

TABLES DES MATIERES

CHAPITRE 1 INTRODUCTION GENERALE ET POSITION DU PROBLEME.....	3
I CADRE GENERAL DU PROJET	3
I.1 Qu'est-ce qu'une molécule ?.....	3
I.2 L'importance de la structure chimique	3
I.3 Comment le dessin et la modélisation des structures chimiques améliorent l'enseignement de la chimie dans les universités.....	6
II ETAT DE L'ART.....	9
II.1 Introduction aux logiciels graphiques.....	9
• Brève histoire sur les logiciels graphiques.....	9
• Les pionniers de la CAO	10
• La chronologie de la CAO	10
II.2 Les logiciels graphiques destinés au dessin chimique.....	11
II.3 ChemDraw, leader des logiciels de dessin chimique.....	12
• La vie avant ChemDraw.....	12
• L'histoire de ChemDraw	13
• L'intégration de ChemDraw dans l'enseignement	14
• Les résultats de l'intégration de ChemDraw dans l'enseignement	17
• L'avis des étudiants	19
II.4 Examen sur quatre types de logiciels de dessin de structure chimique : ChemDraw, ChemWindow, ISIS/Draw et ChemSketch	20
• Présentation	20
• Utilisation	22
• Installation	22
• Dessin chimique primaire.....	22
• Dessin à main levée de la structure chimique.....	23
• Dessin avec des modèles et préréglage	23
• Déduction.....	26
BIBLIOGRAPHIE	27

TABLE DES ILLUSTRATIONS

Figure 1 exemple d'un énantiomère.....	4
Figure 2 structure chimique de l'héroïne et de la morphine	4
Figure 3 Deux énantiomères de thalidomide	5
Figure 4 Divers outils de dessin pour la réalisation de structures chimiques	13
Figure 5 Exemple d'une structure chimique.....	14
Figure 6 Exemple d'une structure chimique avec son nom exact	15
Figure 7 Exemple de conversion de nom à structure	15
Figure 8 Dessin de structures 2D de propane, butane, pentane et prédire leurs propriétés (telles que le point d'ébullition, le log P, la chaleur de formation)	16
Figure 9 Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C ₅ H ₁₂ et prédire leur point d'ébullition.	16
Figure 10 conformateur minimisé no. 1	17
Figure 11 conformateur minimisé no. 2.....	17
Figure 12 Les différentes liaisons disponibles dans chaque logiciel	23
Figure 13 Exemple de modèle (Template) dans le logiciel.....	24
Figure 14 Rétro synthèse du taxol par le groupe Nicolaou	24

Chapitre 1 Introduction générale et position du problème

I Cadre général du projet

I.1 Qu'est-ce qu'une molécule ?

Une molécule est un ensemble d'atomes (au moins deux) identiques ou non, unis les uns aux autres par le biais de liaisons chimiques. Ces dernières sont les résultats de la mise en commun d'un certain nombre d'électrons gravitant sur la couche externe des atomes.

La liaison dite covalente simple est la plus simple des liaisons que l'on puisse rencontrer entre deux atomes lorsque ceux-ci mettent en commun un unique électron de leur couche externe chacun. Les deux électrons en question forment ainsi un doublet liant.

La structure d'une molécule est déterminée par le nombre de doublets d'électrons, liants ou non. Une molécule qui compte quatre liaisons covalentes simples, comme le méthane (CH_4), présente une forme tétraédrique. En revanche, une molécule qui présente quatre liaisons covalentes dont une triple, comme l'acétylène (C_2H_2), sera de forme linéaire. L'objectif étant de minimiser les forces de répulsions entre doublets (Sciences, s.d.).

I.2 L'importance de la structure chimique

Dans le monde de la chimie, la structure peut faire la différence entre la vie et la mort – littéralement. Il existe de nombreux composés pour lesquels une légère modification de la structure ou le choix d'un énantiomère [Caractéristique de certaines molécules stéréoisomères dans lesquelles les deux isomères sont des images miroir l'un de l'autre dans un miroir plan, mais ils ne peuvent pas se chevaucher] différent peut faire passer le composé d'un médicament utile à un médicament dangereux. C'est pourquoi les chimistes sont toujours très conscients de la structure exacte et de certains énantiomères et de leurs effets biologiques spécifiques, car cette information est très importante pour déterminer les effets biologiques des composés, bons et mauvais.

Tout d'abord, commençons par un bref cours de chimie. La structure chimique détermine la géométrie moléculaire d'un composé en décrivant la disposition spatiale des atomes et des liaisons chimiques dans la molécule. Cela fournit aux chimistes une représentation visuelle importante d'une formule chimique. Les énantiomères sont des molécules chirales qui sont des images miroir. En d'autres termes, les énantiomères (illustrés ci-dessous) sont le même composé avec des structures chimiques disposées de manière opposée.

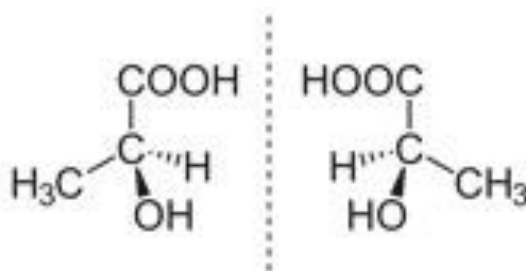


Figure 1 exemple d'un énantiomère

Maintenant que nous avons les connaissances de base nécessaires, nous pouvons discuter des raisons pour lesquelles les énantiomères et les structures sont si importants dans le monde de la chimie. Commençons cette discussion par un jeu de devinettes. Vous trouverez ci-dessous des images de deux composés différents avec des structures légèrement différentes. Comme vous pouvez le voir, la seule différence de structure réside dans les deux groupes fonctionnels en haut et en bas à gauche de chacun. Les deux composés sont utilisés comme analgésiques, mais l'un est prescrit par des médecins professionnels et l'autre est un médicament illégal de l'annexe 1, et couramment utilisé à des fins récréatives.

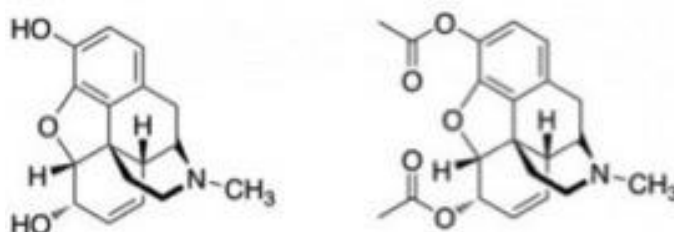


Figure 2 structure chimique de la morphine et de l'héroïne

Le composé de gauche est appelé morphine, et le composé de droite est appelé diamorphine ou diacétylmorphine, plus communément appelée héroïne. Parce que ces deux composés ont fondamentalement la même structure, ils fonctionnent de manière très similaire ; ces composés agissent tous deux directement sur le système nerveux central pour empêcher les signaux de

douleur d'atteindre le cerveau. Cependant, les différents groupes fonctionnels de l'héroïne la rendent plus dangereuse et produisent également des effets euphorisants.

De même, différents énantiomères peuvent produire des effets biologiques très différents du même composé. Un exemple de ceci est le thalidomide. Le thalidomide était utilisée comme médicament contre les nausées matinales pour les femmes enceintes dans les années 1950. Ce n'est que des années plus tard que l'utilisation du thalidomide a été liée à de graves malformations congénitales. Les scientifiques ne savaient pas pourquoi le médicament provoquait des malformations congénitales tout en produisant également des effets antinauséeux positifs, jusqu'à ce qu'ils découvrent que les deux énantiomères avaient des effets biologiques différents sur le corps.

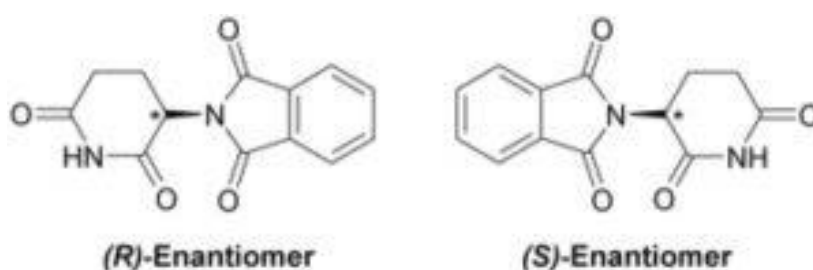


Figure 3 Deux énantiomères du thalidomide

Les deux énantiomères du thalidomide, R et S, sont des images miroir l'un de l'autre ; les énantiomères sont des structures chirales différentes du même composé, différant au niveau du stéréocentre (indiqué par l'astérisque). Ce cas est différent du cas de la morphine contre l'héroïne en ce sens qu'il s'agit du même composé plutôt que de deux composés similaires mais légèrement différents ; les énantiomères du thalidomide ont la même formule chimique mais sont simplement disposés différemment. En raison des différentes orientations spatiales, chaque énantiomère réagit différemment avec le corps. Il en résulte des effets secondaires très différents, certains positifs et certains négatifs. Bien que le thalidomide ait été rapidement rappelée après sa découverte, il est encore utilisée aujourd'hui pour traiter des maladies comme la lèpre et certains cancers comme le myélome multiple. Pourtant, Ces cas illustrent clairement pourquoi il est très important de comprendre les structures et les énantiomères des composés avant de les autoriser à être utilisés par le public et de les prescrire. Les chimistes et les scientifiques sont bien conscients des différents effets biologiques des composés avec des structures et des énantiomères différents, et ils effectuent des recherches intensives sur ces effets avant de les faire autoriser par la FDA pour un usage thérapeutique et

public. Heureusement, dans le cas des énantiomères, les scientifiques peuvent parfois trouver des moyens de séparer les deux isomères R et S afin d'isoler les propriétés positives d'un composé tout en évitant les effets secondaires négatifs. (analyticalansw, 2016)

I.3 Comment le dessin et la modélisation des structures chimiques améliorent l'enseignement de la chimie dans les universités

La chimie peut être décrite à trois niveaux distincts ; à savoir : le niveau macroscopique (visible/phénomènes touchables), le niveau microscopique (atomique/moléculaire), et le niveau symbolique (représentant la matière en termes de formules et équations) (Hinton & Nakhleh, 1999). Les étudiants qui étudient la chimie sont censés penser au niveau microscopique et expliquer les changements aux niveaux macroscopiques (Chandrasegaran, Treagust, & Mocerino, 2008).

Les étudiants doivent associer la structure 2D et 3D des substances chimiques à leurs propriétés physiques [telles que l'état (gaz, liquide ou solide), l'apparence des substances chimiques, le point d'ébullition et le point de fusion, la densité, l'état à température ambiante et la couleur] et les propriétés chimiques (enthalpie de formation, inflammabilité, état d'oxydation préféré, nombre de coordination, etc.).

Les étudiants trouvent cela difficile de relier correctement les différents niveaux de la compréhension. Il semble que les étudiants n'aient pas suffisamment de compréhension du macroscopique/microscopique, les représentations des molécules et la signification des symboles et des formules dans les équations chimiques. Ces difficultés, ainsi que les difficultés à comprendre les structures 3D des molécules, entravent la capacité des étudiants à résoudre des problèmes en chimie. Les éducateurs scientifiques ont proposé plusieurs solutions pour surmonter ces difficultés, telles que : l'intégration d'outils de visualisation tridimensionnelle ; promotion du passage entre différentes représentations chimiques (Wu & Shah, 2004).

Les chercheurs ont constaté que l'intégration visuelle des représentations telles que les modèles moléculaires informatisés, les simulations, et des animations dans l'enseignement peuvent promouvoir la compréhension par les étudiants des phénomènes inobservables scientifiques, et leur donner la possibilité de rendre visibles les concepts abstraits. La manipulation des structures chimiques dans les représentations 2D/3D aide les élèves à relier les niveaux de représentation macroscopique, microscopique et symbolique des produits

chimiques les uns aux autres et améliorer la compréhension conceptuelle et la capacité spatiale des étudiants (JK, 2005).

Il existe de nombreux outils qui permettent aux élèves de manipuler des structures chimiques dans des représentations 2D ou 3D et de construire des modèles moléculaires. Le *tableau 1* résume quelques-uns des outils informatiques célèbres.

Le logiciel ChemDraw est l'outil de dessin de choix pour les chercheurs pour dessiner des structures chimiques pour des publications/présentations et pour interroger des bases de données chimiques. Dans la plupart des établissements universitaires, le programme est utilisé pour dessiner des produits chimiques mais pas comme un outil d'enseignement. Une version du logiciel pour iPad a été développée récemment et Michael Lewis de l'Université de Saint Louis a rapporté dans EmergingEdTech qu'ils l'utilisent en classe dans le but pour engager tous les étudiants et les inciter à participer. La fonction utilisée du logiciel est la fonction de dessin de structures chimiques. Cependant, ChemDraw a un ensemble d'outils puissants qui pourraient être utilisés dans l'enseignement, profiter de l'ensemble des outils pour calculer/prédire des propriétés chimiques/physiques, générer des spectres, construire des noms IUPAC correctes et calculer la réaction stœchiométrie. (Raiyan & Raiyan, 2015)

Tableau 1 Liste des éditeurs de dessin chimique et de modélisation fonctionnant sur Windows.

Logiciel	Développeur	Information
ChemDraw	Cambridge Soft	Logiciel payant, considéré comme le leader du marché
Avogadro	Avogadro Project team	Éditeur de molécules 3D et de visualisation
Chem Window	Bio-Rad	Logiciel gratuit pour la recherche universitaire et l'enseignement
KnowItAll	Bio-Rad	Logiciel gratuit pour la recherche universitaire et l'enseignement
Accelrys Draw	Accelrys	Logiciel gratuit pour un usage personnel
ACD/ChemSketch	ACD/Labs	Logiciel gratuit pour un usage personnel
BALLView	BALL Project team	Visualiseur, éditeur et outil de simulation
MedChem Designer	Simulations Plus	Logiciel gratuit - comprend le calcul de logP, logD (7.4), les charges sigma, la liaison hydrogène Donneurs, accepteur de liaisons hydrogène
ICM-Chemist	MolSoft	Éditeur de chimie de bureau avec interface utilisateur graphique facile à utiliser
ChemDoodle	iChemLabs	Le seul outil de dessin chimique qui contient le formatage de fusion en exposant et en indice dans les champs de texte pour créer facilement des notations atomiques
ArgusLab		Logiciel gratuit
Ascalaph	Agile Molecule	Logiciel gratuit
Amira	Visage Imaging Zuse Institute Berlin	Version d'essai de 14 jours disponible

II Etat de l'art

II.1 Introduction aux logiciels graphiques

Un affichage graphique est une zone de dessin composée d'un tableau de points fins appelés pixels. Au cœur d'un système graphique se trouve un stylo magique, qui peut se déplacer à la foudre vitesse à un pixel spécifique et dessinez le pixel avec une couleur spécifique - un rouge, vert et valeur du vecteur bleu (RVB). Ce stylo peut être contrôlé directement à la main via une entrée périphérique (souris ou clavier) comme un simple pinceau. Dans ce cas, on peut dessiner quoi que nous imaginions, mais il faut un vrai artiste pour arriver à un bon tableau.

L'infographie, cependant, consiste à utiliser ce stylet automatiquement via la programmation. Un objet réel ou imaginaire est représenté dans un ordinateur comme un modèle, et est affiché comme une image. Un modèle est une description abstraite de la forme de l'objet (sommets) et attributs (couleurs), qui peuvent être utilisés pour trouver tous les points et couleurs sur l'objet correspondant aux pixels de la zone de dessin. Étant donné un modèle, l'application programmée contrôlera le stylo via une bibliothèque graphique pour générer l'image. Une image est simplement un tableau 2D de pixels. Une bibliothèque graphique fournit un ensemble de commandes ou de fonctions graphiques. Ces commandes peuvent être liées en C, C++, Java ou d'autres langages de programmation sur différentes plateformes. Les commandes graphiques peuvent spécifier des géométries primitives 2D et 3D (Jim X, 2009).

- *Brève histoire sur les logiciels graphiques*

Il est assez facile d'être fasciné par des structures historiques comme le Colisée ou le Panthéon à Rome, surtout si l'on considère qu'il y a 2000 ans, ils n'avaient certainement pas l'équipement de construction ou les outils de conception que nous utilisons aujourd'hui. Cela ne veut pas dire qu'une planification et un dessin minutieux n'ont pas été utilisés - le placement de chaque pierre et colonne de support devait également être pris en compte à l'époque, mais il n'y avait certainement pas de cours de CAO (conception assistée par ordinateur) disponibles pour aider dans le processus !

La conception et la rédaction techniques modernes sont largement attribuées au développement de la géométrie descriptive aux XVIe et XVIIe siècles. Les techniques de dessin ont fait un grand pas en avant avec l'introduction des machines à dessiner, mais la façon

dont les dessins techniques étaient réalisés n'a pas beaucoup changé avant la Seconde Guerre mondiale.

Pendant la guerre, des efforts considérables ont été déployés pour développer l'informatique en temps réel, en particulier au MIT, et dans les années 1950, des dizaines de personnes se sont concentrées sur l'automatisation de la conception technique. Il y a deux personnes en particulier qui sont en grande partie responsables de préparer le terrain pour ce que nous connaissons aujourd'hui sous le nom de conception assistée par ordinateur (CAO) (digitalschool, s.d.).

- ***Les pionniers de la CAO***

Considérés comme les deux principaux innovateurs de la CAO, Patrick J. Hanratty et Ivan Sutherland ont apporté des contributions révolutionnaires, notamment : En 1961, Patrick Hanratty rejoint les laboratoires de recherche de General Motors où il participe au développement du DAC (Design Automated by Computer), le premier système de CAO à utiliser des graphiques interactifs.

Ivan Sutherland a innové en matière de modélisation informatique 3D et de simulation visuelle, qui constituent la base de la CAO. Son doctorat de 1963. La thèse au MIT était «Sketchpad: A Man-Machine Graphical Communications System». Il permet aux concepteurs d'utiliser un crayon optique pour créer des dessins techniques directement sur un tube cathodique.

Les années 1960 se sont avérées être la période de recherche la plus critique pour l'infographie interactive. Le développement du système de carnet de croquis a révolutionné la conception car il a rendu possible la création de dessins et le déplacement et le changement interactifs d'objets sur un écran d'ordinateur. Le terme CAO a commencé à apparaître avec le mot « conception » car il allait au-delà des concepts de base du dessin.

- ***La chronologie de la CAO***

Dans les années 1970, les premiers programmes de CAO n'étaient capables que de créer des dessins 2D, qui étaient similaires aux dessins faits à la main à l'époque. Quoi qu'il en soit, les premiers programmes simples commençaient à changer la façon dont les industries de la fabrication et de la construction considéraient le design. Une grande partie de la recherche est passée de la création de conception 2D à la conception 3D.

À la fin des années 1970, les premiers logiciels de modélisation solide ont commencé à apparaître, donnant aux concepteurs la possibilité de combiner des formes géométriques de base.

Au cours des années 1980, la modélisation 3D a émergé à mesure que de nouvelles théories et algorithmes évoluaient. Plus tard dans la décennie, la technologie de modélisation solide pour le rendu des conceptions 3D a été intégrée dans les nouveaux programmes de CAO.

Dans les années 1990, les PC étaient suffisamment puissants pour prendre en charge les logiciels de CAO tels qu'AutoCAD, faisant de ces programmes un nom familier pour les concepteurs de tous les secteurs. La formation CAO est devenue synonyme de formation à l'architecture et les programmes n'ont cessé de devenir de plus en plus conviviaux depuis.

Le développement actuel des programmes de CAO se concentre sur l'automatisation de différents aspects de la conception et de la fabrication, la vitesse et l'efficacité, et le développement de nouveaux algorithmes (digitalschool, s.d.).

II.2 Les logiciels graphiques destinés au dessin chimique

Le logiciel de dessin de structure chimique est spécialisé dans l'information structurale chimique en ce qui concerne le traitement, stockage, rendu et édition. Avec l'avènement de la bio-informatique et l'explosion de la chimio-informatique, les logiciels informatiques professionnels de chimie pour les ordinateurs personnels développés rapidement. Pour la complexité et la spécialité de l'information chimique, d'utiliser un logiciel de dessin à usage général dans le dessin de la structure chimique était laborieux et inefficace. Le résultat n'était pas satisfaisant même dans le cas de simples dessins moléculaires. L'expression de la structure moléculaire tridimensionnelle et la conversion de la structure moléculaire du bidimensionnel au tridimensionnel (2D à 3D) ont été irréalisables par un logiciel graphique commun. Plus d'une douzaine d'années de cela, les professionnels de la chimie utilisaient des stylos à encre et ensembles de pochoirs chimiques pour préparer des documents ou des présentations. À main levée le dessin chimique n'était pas rare dans les publications professionnels (Zhenjiang, Honggui, Shi, & Pingkai, 2004).

De nos jours, les gens en chimie s'habituent à une variété de logiciels de dessin chimique d'une dizaine de mégabits. Le logiciel mince et compact pour le dessin chimique du temps

DOS semble être une mémoire distante. Si c'était une rareté dans le temps DOS, le logiciel de dessin chimique est banal maintenant. Les chimistes l'utilisent tous les jours. Il y en a plus d'une douzaine de logiciels de dessin chimique populaires, tels que ChemDraw, ChemWindow, ChemPen, C-Design, Chem-Frontier, DrawMol et MolDraw, qui appartiennent aux logiciels autonomes et ISIS/Draw, ChemSketch et Chemistry 4-D Draw, qui fonctionnent comme des logiciels d'interface ou des compléments. Les logiciels d'interface font généralement partie d'une suite et peuvent être utilisés indépendamment. De puissants logiciels autonomes tels que ChemDraw et ChemWindow sont membres d'une suite commerciale (Zhenjiang, Honggui, Shi, & Pingkai, 2004).

II.3 ChemDraw, leader des logiciels de dessin chimique

- *La vie avant ChemDraw*

Jusqu'à l'introduction des programmes de dessin de structure informatisé au milieu des années 1980, les publications sur le dessin des structures chimiques de qualité étaient généralement produites par un campus ou par le centre départemental des arts graphiques. Les ensembles de lettrage de « Lerroy » communément appelés « Lerroy Lettering Set » étaient invariablement utilisés pour produire des dessins à l'encre de Chine sur vélin, un papier de qualité parchemin (*Figure 4*). Ces ensembles fournissent une collection de modèles de différentes tailles de police. Audacieux et les lettres en italique exigeaient chacune le modèle requis et stylo. Le stylo spécialisé a facilité la transcription de modèle sur vélin. Helvetica était la seule option de police. La différente taille de bagues étaient généralement dessinées à l'aide d'un modèle tel que le Triangle de Fieser (*Figure 4*). C'était le rare étudiant qui s'aventurerait dans ce domaine de complexité technique en raison de l'engagement de temps. En général, les élèves ont utilisé le triangle Fieser, un stylo et des décalcomanies de lettres à transfert à sec pour générer des structures. Des décalcomanies de transfert à sec de flèches régulières et courbes étaient également facilement disponibles. Dans tous les cas, dessiner des graphiques chimiques était une tâche laborieuse à laquelle il fallait faire face dans la préparation de publications et de thèses. Les étudiants qui consacraient trop de temps à cette activité l'ont fait au risque de faire des progrès insuffisants en laboratoire (David A, 2014).

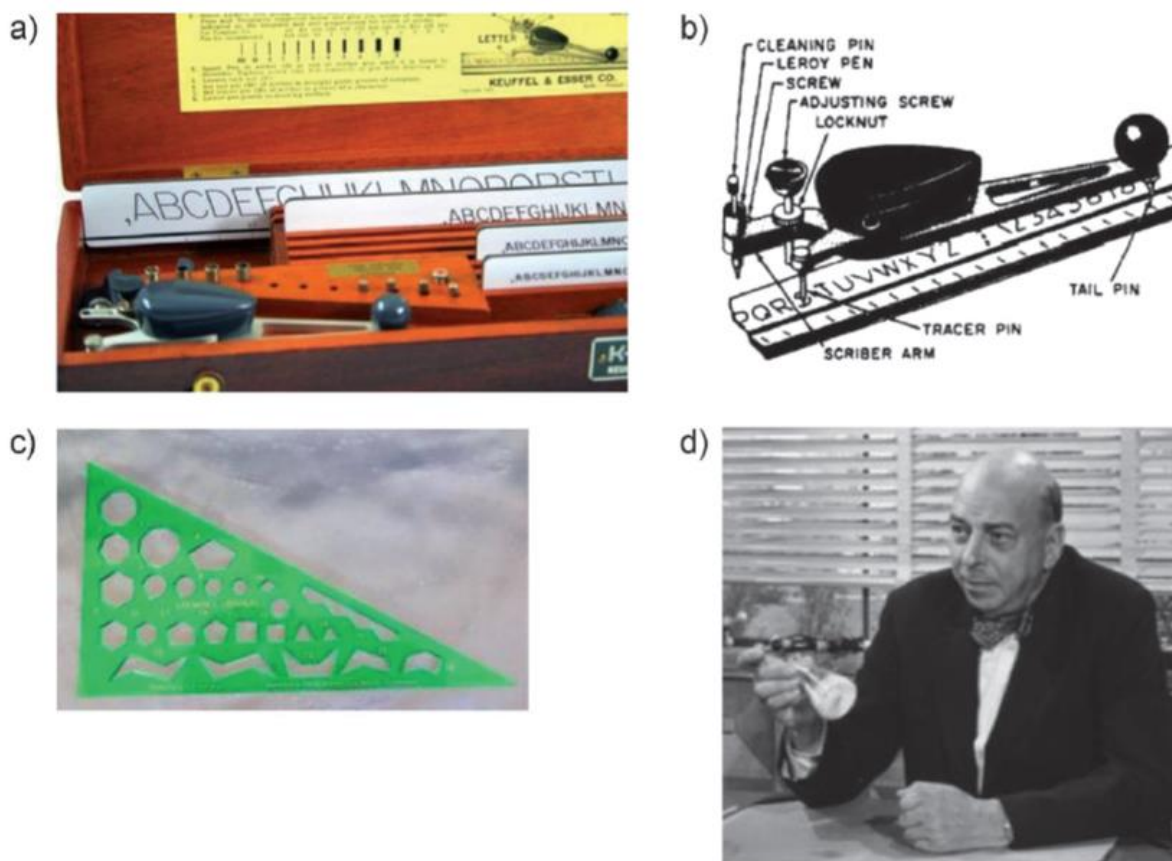


Figure 4 Divers outils de dessin pour la réalisation de structures chimiques : a) Leroy Lettering Set, b) Leroy Lettering Pen, c) Le Triangle du Chimiste développé par le Professeur Louis Fieser, d) portrait de Louis Fieser à l'université d'Harvard

- **L'histoire de ChemDraw**

En 1986, Stewart Rubenstein et David et Sally Evans, de l'Université Harvard, Cambridge, MA, États-Unis, ont introduit le premier programme graphique chimique ChemDraw. Aujourd'hui, il est devenu le véhicule dominant pour dessiner des structures chimiques dans la communauté de la chimie organique.

Dans les années 1980, le dessin de graphiques chimiques était une tâche à forte intensité de main-d'œuvre qui était généralement effectuée par une installation d'arts graphiques sur le campus ou départementale. Quand Apple a introduit le Macintosh en janvier 1984, Stewart Rubenstein et David et Sally Evans pensaient que le programme MacDraw était une bonne base pour développer un programme de création de structures chimiques à un coût raisonnable.

En quelques semaines, Stewart Rubenstein, alors étudiant en doctorat, avait développé un programme rudimentaire. Il a peaufiné cela après de nombreuses discussions avec David et Sally Evans.

En juillet 1985, David Evans a présenté le développement en cours du programme ChemDraw lors d'une conférence Gordon sur les réactions et les procédés. Son groupe de recherche a participé au test bêta et en 1986/1987, la première des cinq thèses de doctorat a été rédigée à l'aide de ChemDraw (CD).

Le développement du programme compagnon de dessin de structure tridimensionnelle, Chem3D, a commencé dans les derniers mois de 1985 par Michael Rubenstein, le frère cadet de Stewart (David A, 2014).

- ***L'intégration de ChemDraw dans l'enseignement***

La nomenclature et la structure moléculaire sont fréquemment les premiers sujets que les étudiants rencontrent en chimie organique. Les élèves rencontrent des difficultés d'apprentissage nomenclature des manuels de chimie et des enseignants (Obumnenye & Ahiakwo, 2013).

Le logiciel ChemDraw offre plusieurs fonctionnalités qui permettent aux étudiants d'apprendre efficacement ces sujets. Par ChemDraw nous convertissons les formules chimiques et les noms chimiques aux structures squelettiques et vice versa ainsi que les structures squelettiques/condensées à leurs Noms IUPAC correspondants (Eller, 2006).

Ici, nous donnons quelques exemples pratiques : Nous dessinons la structure chimique suivante :

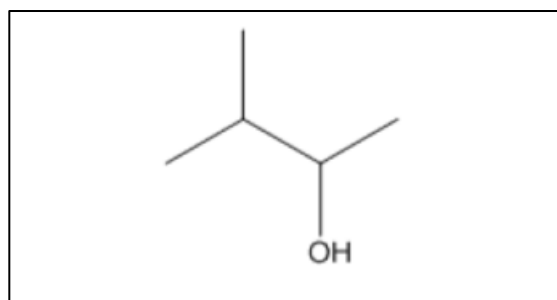


Figure 5 Exemple d'une structure chimique

Et plus tard en cliquant sur l'icône "convertir la structure en nom". Cela donne :

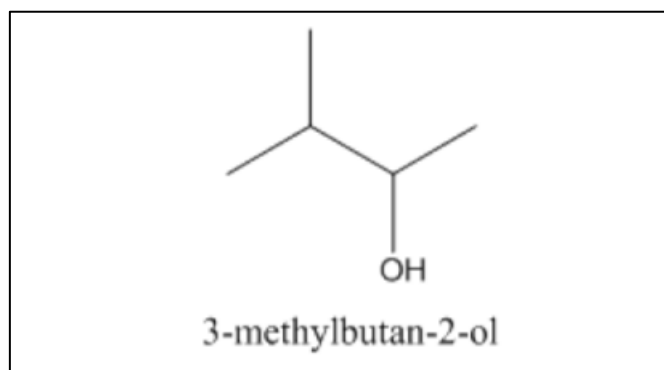


Figure 6 Exemple d'une structure chimique avec son nom exact

Nous pouvons également convertir des noms en structures. Quand nous cliquons sur l'icône pour convertir le nom en structure et que nous tapons "2 méthyl 2 propanol" cela donne :

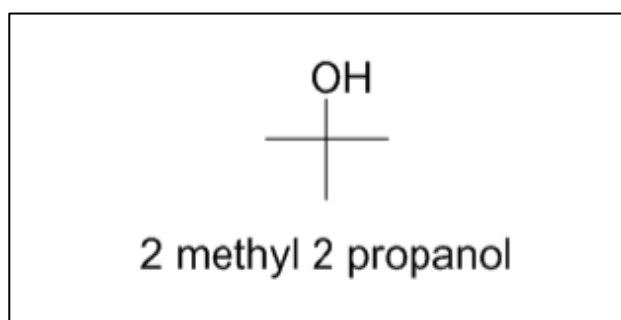


Figure 7 Exemple de conversion de nom à structure

Avec le logiciel ChemDraw, nous pouvons dessiner facilement des structures chimiques et prédire leurs propriétés physiques et chimiques (*figure 8*). Cela pourrait permettre aux étudiants de bien comprendre et interpréter la relation entre les structures chimiques et les propriétés physiques/chimiques telles que la polarité, point d'ébullition/point de fusion et chaleur de formation. Ici nous donnons un exemple pratique révélant la relation entre les points d'ébullition des alcanes/lipophilie et la taille moléculaire (ou nombre d'atomes de carbone) :

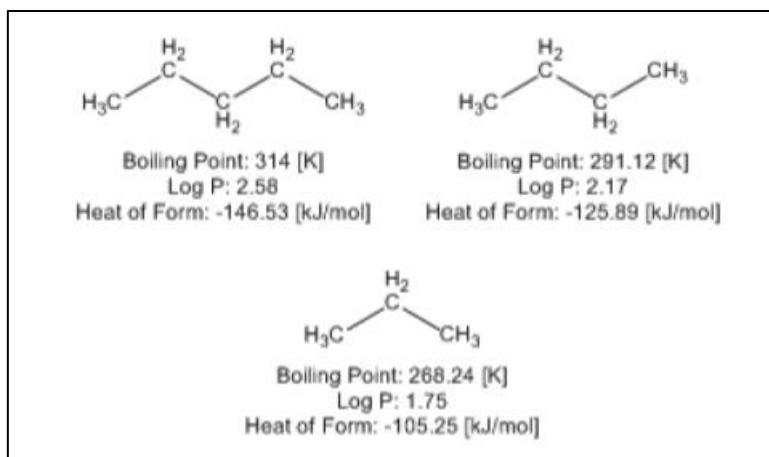


Figure 9 Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C_5H_{12} et prédire leur point d'ébullition.

Ainsi que la relation entre le degré de branche dans les alcanes et point d'ébullition :

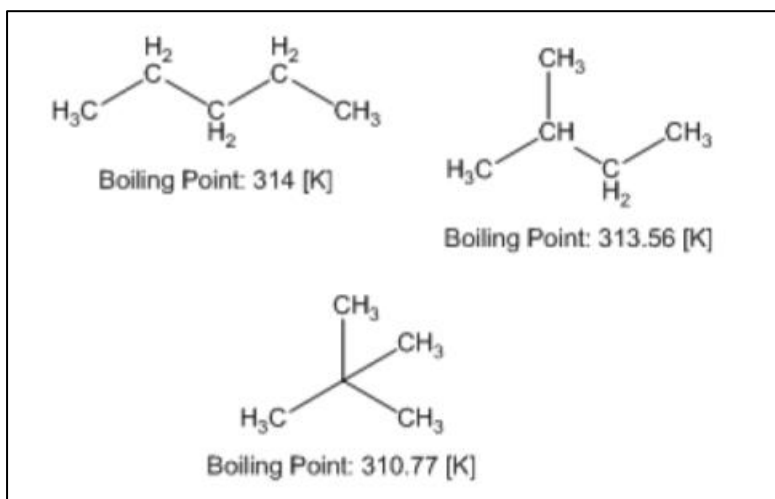


Figure 8 Dessin de structures 2D de propane, butane, pentane et prédire leurs propriétés (telles que le point d'ébullition, le log P, la chaleur de formation)

L'étudiant peut comprendre que la ramification diminue le point d'ébullition. Cela vaut la peine d'attribuer que les points d'ébullition indiqués sont ceux prédits et non l'exact points d'ébullition expérimentaux.

Les étudiants pourraient intérioriser plus correctement certains des concepts tels que « une molécule est en mouvement continu » en pratiquant le dessin chimique et la modélisation 3D. Ainsi, ils seront capables de corréler entre la conformation et l'énergie/stabilité et mieux comprendre des termes comme van-der-Waals et les liaisons hydrogène. Nous donnons ici un exemple pratique, démontrant en convertissant une structure bidimensionnelle en une structure tridimensionnelle d'une molécule en mouvement (différents conformères ayant différents types d'interactions, conduisant à différentes énergies et stabilités) :

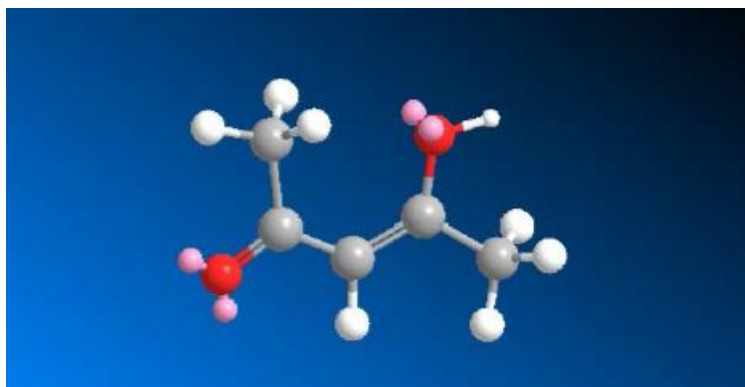


Figure 10 conformateur minimisé no. 1

L'énergie totale est égale à 3,7 kcal/mole. Intramoléculaire la liaison hydrogène n'existe pas. Le donneur de protons est loin de l'accepteur de protons. Cela vaut la peine d'attribuer ceci à des conditions cruciales pour faire la liaison hydrogène, l'interaction disponible est que la distance entre le proton le donneur et l'accepteur de protons doivent être inférieurs à 3,5 Å.

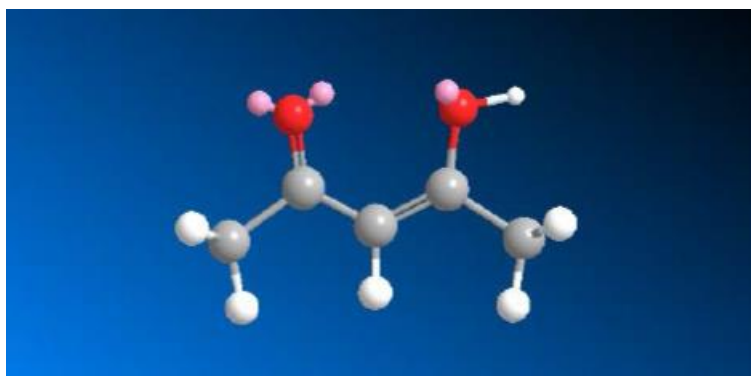


Figure 11 conformateur minimisé no. 2

L'énergie totale est égale à 6,2 kcal/mole. La liaison hydrogène intramoléculaire n'existe pas dans ce conformère car l'atome d'hydrogène pointe vers la direction opposée de l'atome d'oxygène carbonyle et il y a une interaction répulsive entre les deux atomes d'oxygène en raison de la proximité des paires d'électrons isolés. Cette interaction répulsive contribue trop à l'augmentation totale de l'énergie (Raiyan & Raiyan, 2015).

- ***Les résultats de l'intégration de ChemDraw dans l'enseignement***

L'objectif principal est d'améliorer la qualité de l'enseignement de la chimie dans les universités et de rendre l'expérience d'apprentissage plus intéressante et stimulante en combinant des approches et des techniques de modélisation informatisées avec le paradigme d'enseignement actuel, en fournissant de nouveaux outils pour l'apprentissage actif, un environnement d'étude interactif et l'expansion des sources de connaissances.

De nombreuses études indiquent que l'apprentissage frontal traditionnel est un moyen d'acquérir des connaissances mais il n'est conservé que pour une courte durée. Cependant, les connaissances acquises dans des conditions d'environnement d'étude interactive combinées avec les sens de la vue et de la détection peuvent durer plus longtemps. De cette façon, le rôle principal de l'instructeur n'est pas seulement le transfert de connaissances pour ses étudiants mais de leur partager un processus actif de création et d'acquisition de connaissances.

Les mesures d'évaluation sont basées sur les résultats, qui reflètent une compréhension approfondie des concepts et de la mise en œuvre du matériel étudié. Ces sujets ont été testés avec deux examens auxquels les étudiants du Collège universitaire d'éducation d'Al-Qasemi ont accédé comprenaient des questions sur :

- Structures tridimensionnelles des produits chimiques et polarité des produits chimiques.
- Relations entre les points de fusion/ébullition et les types d'isomères.
- Conversion de noms en structures chimiques bidimensionnelles.
- Conversion de structures chimiques bidimensionnelles en noms.

Voici un résumé des activités de l'initiative menées au cours du 2^e semestre de l'année universitaire 2014 :

- Examen préalable en atelier.
- Atelier : introduction à l'utilisation du logiciel CHEMDRAW.
- La propre pratique des étudiants (en raison de la limitation du temps de cette initiative, elle n'était disponible que pendant quelques jours).
- Examen post-atelier.
- L'analyse des résultats.

Le *tableau 2* résume les résultats, révélant que l'intégration du logiciel CHEMDRAW dans l'enseignement de la chimie a aidé à comprendre certains des concepts étudiés, par ex. la structure tridimensionnelle et la polarité, le point d'ébullition et les structures des isomères, et

la mise en œuvre des règles AUPAC dans la conversion des noms chimiques en structures, et vice versa.

Tableau 2 Comment l'intégration du logiciel CHEMDRAW dans l'enseignement de la chimie affecte-t-elle les résultats des étudiants aux examens [ET = Ecart-Type]

Type de question	Moyenne I (ET)	Moyenne II (ET)	Amélioration (ET)
Nom chimique à structure	5.83 (2.22)	7.08 (2.39)	1.25 (1.98)
Structure chimique à nom	5.33 (1.93)	7.96 (2.40)	2.62 (1.61)
Structure 3D et polarité	5.94 (2.21)	8.15 (1.94)	2.21 (1.89)
Moyenne totale	5.70	7.73	2.03

- *L'avis des étudiants*

Nous sommes arrivés à la conclusion que l'intégration de la modélisation des outils tels que le logiciel CHEMDRAW en chimie l'éducation est utile. L'amélioration de la moyenne score de 5,7 (avant l'incorporation de CHEMDRAW) à 7,3 (après l'incorporation de CHEMDRAW) est très impressionnant. L'avis des étudiants à la suite de l'initiative a été positif et très encourageant. La plupart des étudiants ont déclaré qu'avec CHEMDRAW, ils ont connu un environnement d'apprentissage stimulant avec des illustrations dynamiques et des visuels interactifs et aimeraient voir un tel logiciel intégré dans leurs études de chimie dès le premier jour. D'autres paramètres pourraient être testés à l'avenir, par ex. L'attitude des étudiants envers l'apprentissage de la chimie ainsi qu'une compréhension conceptuelle plus approfondie des produits chimiques par les étudiants (Raiyan & Raiyan, 2015).

II.4 Examiner quatre types de logiciels de dessin chimique : ChemDraw, ChemWindow, ISIS/Draw et ChemSketch

- *Présentation*

ChemDraw, ChemWindow, ISIS/Draw et ChemSketch sont les logiciels de dessin chimique les plus populaires de ces dernières années. ChemDraw est le membre de dessin chimique de la célèbre suite logicielle chimique commerciale ChemOffice. ChemWindow a d'abord été intégré à Bio-Rad Sadtler Suite, puis à KnowItAll Analytical Systems après la fusion de SoftShell par Bio-Rad Laboratories. ISIS/Draw est le logiciel d'interface avec la base de données ISIS/Base et membre du MDL ISIS. ChemSketch est le logiciel interfacial et membre de l'ACD/Labs. Les principes fondamentaux des quatre types de logiciels sont répertoriés dans le *tableau 3*.

Des quatre types de logiciels, ChemDraw est un logiciel de dessin chimique spécialisé développé par CambridgeSoft. ChemWindow était un logiciel de dessin chimique spécialisé avant la version 6.0, et c'est maintenant le logiciel d'interface de KnowItAll Analytical Systems. ISIS/Draw est conçu par MDL Information Systems pour son bundle MDL ISIS. ChemSketch est le logiciel graphique interfacial pour la suite ACD/Labs par Advanced Chemistry Development. Quant au statut du logiciel, ChemDraw était commercial dès sa première publication. Une copie gratuite de ChemWindow était disponible lorsqu'elle était sous SoftShell, la situation a changé et aucune ChemWindow gratuite n'est proposée au nom de Bio-Rad Laboratories. À la consternation de nombreux amateurs de cadeaux, Advanced Chemistry Development a déclaré que la copie gratuite des membres de la suite ACD/Labs n'est plus fournie dans la nouvelle version 6.0, mais qu'une copie gratuite de la version 5.0 précédente est toujours disponible pour le moment. ISIS/Draw de la MDL est le seul des quatre à avoir une politique libre en permanence. C'est peut-être le meilleur choix pour les étudiants et les utilisateurs légers. Récemment, l'édition académique de KnowItAll 3.0 est offerte gratuitement par Bio-Rad Labs sur le Web. C'est une bonne nouvelle pour les utilisateurs académiques. Il convient de mentionner que lorsque la nouvelle édition d'ISIS/Draw 2.5 a été publiée, l'édition 2.4 a disparu sur le site Web de MDL, mais la version 2.3 précédente est toujours disponible.

Tableau 3 Bref résumé et comparaison des quatre types de logiciels chimiques

Logiciel	ChemDraw 5.0	ChemWindow 6.0	ISIS/Draw 2.5	ChemSketch 5.12
Suite	ChemOffice	Bio-Rad Sadtler Suite	MDL ISIS	ACD/Labs
1ere publication/ version actuelle	1985/19.1	1989/6.5	1990/2.5	1994/2020.2.1
Espace minimum requis	42,58Mo	37,07Mo	10,31Mo	17,01Mo
CPU minimum	Pentium	Pentium	X486	Pentium 300 MHz
RAM recommandée	Plus de 32Mo	Plus de 32Mo	Plus de 16Mo	Plus de 32Mo
Type	Commercial	Commercial	Gratuit	Gratuit (avant v.6)
Autres compléments/ utilitaires	NA/Oui	NA/Oui	NA/Oui	Oui/Oui
Compléments à des tiers	NA	NA	NA	Oui
Service de plug-in	ChemDraw Plug-in	BrowseIt	ISIS/host	ACD/I-Lab
Graphiques 3D	Chem3D	SymApps	RasMol	3D Viewer

- ***Utilisation***

La situation d'utilisation d'un logiciel particulier dépend largement des besoins de travail de l'utilisateur. Prenons l'exemple de ChemOffice 5.0 Ultra, le manuel d'utilisation de ChemDraw fait 222 pages ; le manuel de Chem3D fait 244 pages. Il faudra beaucoup de temps pour lire les manuels et essayer les exercices du didacticiel. Maîtriser un logiciel de dessin chimique professionnel comme ChemDraw n'est pas une tâche facile. La plupart des utilisateurs ont tendance à être limités à l'étendue de leur demande pratique. Ils peuvent être plus familiers avec plusieurs fonctions étroitement associées à leur travail de routine, mais ne sont pas conscients de certains usages fondamentaux d'autres fonctions.

- ***Installation***

Les quatre types de logiciels sont faciles à installer. À l'exception de ChemOffice, les trois autres sont livrés avec des options de configuration. ChemSketch et ISIS/Draw sont entrés dans la fenêtre des modules de fonction en option après avoir cliqué sur l'installateur, et les modules pourraient être cochés. ChemWindow est allé aux options « Typique », « Compact » et « Personnalisé ». L'installation complète est recommandée à moins qu'il n'y ait une limitation matérielle. En plus d'ACD/Labs, Advanced Chemistry Development a fourni des compléments gratuits pour ChemSketch et des compléments gratuits pour le logiciel tiers, qui comprenait ChemDraw et ISIS/Draw.

- ***Dessin chimique primaire***

Les outils de dessin de base ont été définis par le préréglage du logiciel après être entré dans l'interface utilisateur. La fenêtre de ChemWindow semblait la plus simple avec une seule barre d'outils standard, mais les utilisateurs pouvaient choisir jusqu'à 12 barres d'outils en plus d'une règle et d'une barre d'état. ISIS/Draw et ChemDraw sont livrés avec une interface concise. Ils étaient équipés de deux barres d'outils fixes et d'une règle et d'une grille en option. ISIS/Draw semblait plus simple et agréable aux yeux des deux. ChemSketch est apparu un peu redondant au premier coup d'œil de son interface et était encombrant pour les débutants. Il semblait que tous les outils étaient empilés sur le bureau, à l'exception de la grille. Il y a deux interfaces qui peuvent être commutées. Le préréglage du logiciel est « Structure » et l'autre est « Dessiner ». Seules une barre d'outils standard et une barre d'outils de dessin sont fixées dans les commutateurs.

- **Dessin à main levée de la structure chimique**

Dessiner des structures et des réactions simples est souvent réalisé à main levée. Dans le dessin d'objets compliqués, le dessin à main levée est indispensable dans la finition et la modification des détails après l'utilisation des modèles. Dans la barre d'outils standard, les outils de liaisons, d'atomes (ou d'éléments), de chaînes, de flèches, de lignes, de courbes et de polygones sont les plus utiles. L'utilisation de l'outil de liaison du logiciel est illustrée dans la (figure 12). Parmi les quatre, ChemDraw et ChemWindow se classent au premier rang pour le nombre de types de liaisons, et ChemSketch se classe dernier mais avec une excellente fonction. ISIS/Draw est faible dans ce terme.

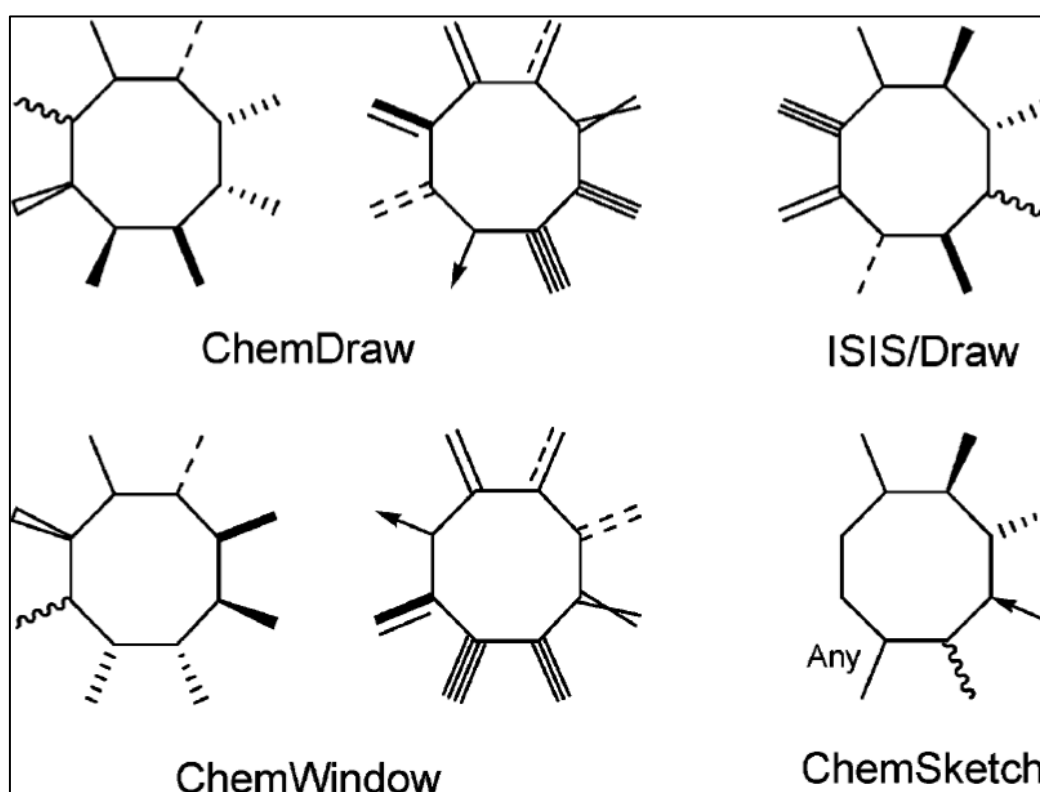


Figure 12 Les différentes liaisons disponibles dans chaque logiciel

- **Dessin avec des modèles et préréglage**

Les modèles de ChemSketch sont les plus puissants et conviviaux. ChemSketch et ChemDraw fournissent des modèles clients. Les deux autres non. Ces dernières situations peuvent être contournées. Dans ISIS/Draw, les modèles doivent être préparés au préalable, enregistrés dans le dossier « Template », puis importés dans le nouveau modèle en l'ouvrant dans l'« Éditeur de modèles ». Dans ChemWindow, aucune fonction d'édition de modèle n'est disponible ; un fichier modèle client peut être enregistré dans le dossier « Modèle », puis ouvert dans la boîte de dialogue « Préférences » du menu « Fichier », et désigné comme chemin du

fichier modèle client. La taille du fichier modèle de ChemWindow est importante. Une grande variété de structures moléculaires de 2000 et 3000 sont logées dans deux des quatre modèles. Certains modèles du logiciel sont illustrés à la (figure 13).

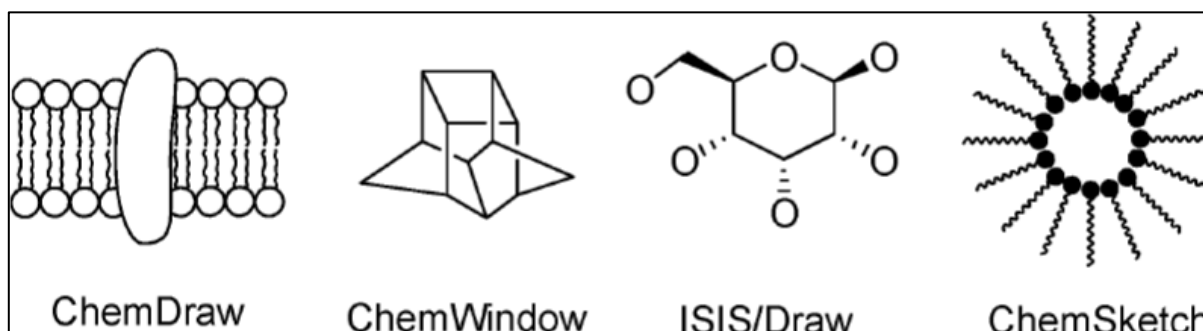


Figure 13 Exemple de modèle (Template) dans le logiciel

Utiliser un modèle dans un travail de dessin est fondamental. Beaucoup d'efforts doivent être faits sur la base de dizaines de modèles. Comme illustré sur la (figure 14), dans l'analyse de rétrosynthèse⁷ du taxol, des modèles de cycles carbonés, de cycles fusionnés, de chaînes aliphatiques, de groupes, de flèches et de symboles de réaction ont été utilisés ; des fonctions d'élément, de lien, de lignes et de légende ont été utilisées.

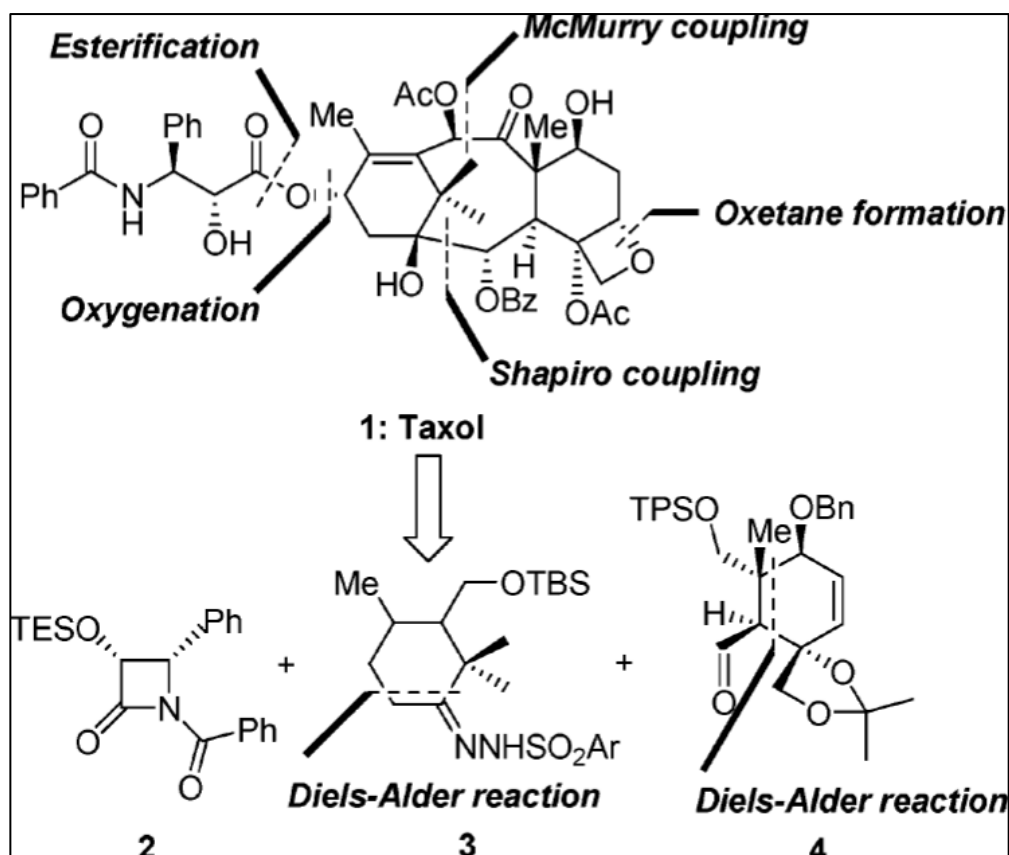


Figure 14 Rétro synthèse du taxol par le groupe Nicolaou

De plus, les opérations de sélection, déplacement, duplication, collage, rotation, réflexion, retournement et alignement sont indispensables. Plusieurs ensembles de styles de publication de revues chimiques universitaires fréquemment consultées sont prédéfinis dans le logiciel. Le format de publication de l'American Chemical Society est souvent utilisé. ChemDraw a adopté le format 1996 des documents de publication ACS comme l'un de ses styles prédéfinis. D'autres exemples sont le style JOC (J. Org. Chem.) dans ChemWindow, le style TETRA (Tetrahedron series) dans ISIS/Draw et le style JMolModl dans ChemSketch. Les styles de journal du logiciel sont résumés dans le (*tableau 4*).

Tableau 4 Caractéristiques fonctionnelles des quatre types de logiciels chimiques

Logiciel	ChemDraw 5.0	ChemWindow 6.0	ISIS/Draw 2.5	ChemSketch 5.12
Paramètres de style de journal	8	6	9	6
Derniers fichiers	NA	4	9	10
Type de liaison	9	14	8	6
Flèches	41	11	30	67
Modèles/Ensemble d'utilisateurs	12/Oui	6/Oui	23/Oui	42/Oui
Verrerie	Oui	Oui	NA	Oui
Structure à nom	Oui	NA	Oui	Oui
Nom à structure	Oui	NA	NA	Oui
Surnom	Oui	Oui	NA	Oui
Structure propre	Oui	Oui	Oui	Oui
2D à 3D	Oui	Oui	Oui	Oui
Prédiction de propriétés	Oui	NA	NA	Oui

- **Déduction**

Les quatre types de logiciels de dessin chimique peuvent bien faire un travail de dessin 2D. Les progrès de ChemSketch sont remarquables en termes d'amélioration globale des performances et de développement de modules intelligents. Il permet l'intégration de la 3D, du traitement spectral, du calcul spectral, de la prédiction des propriétés physico-chimiques et du service en ligne, qui représentent la tendance technique dominante dans les logiciels de dessin chimique. ChemDraw en tant que logiciel de dessin traditionnel est le plus puissant en dessin, mais la fonction 3D n'est pas intégrée, et les fonctions spectrales doivent être améliorées. Les performances globales de ChemWindow sont considérablement améliorées après son intégration dans KnowItAll. En plus de ses fonctionnalités dans un module d'appareils de laboratoire et un module de processus de génie chimique, la fonction de traitement de l'information spectrale est exceptionnelle en raison de sa fusion avec Bio-Rad. De manière générale, ChemWindow et ChemSketch sont comparables dans les performances globales. ISIS/Draw est un logiciel de dessin purement chimique. Il n'y a aucun signe de le développer en un logiciel complet de structure chimique dans la plus récente édition 2.5. La fonctionnalité impressionnante d'ISIS/Draw est simple. Faire une évaluation 1,9 sur un logiciel de dessin chimique n'est pas une tâche facile.

La préférence d'un logiciel professionnel dépend principalement de l'objectif de l'utilisateur. Il semble donc improbable de faire une recommandation largement acceptable. Pour les utilisateurs axés sur le dessin 2D, ISIS/Draw est le premier choix. ChemDraw plus Chem3D est sans aucun doute le meilleur pour les utilisateurs professionnels de la 3D. ChemSketch répond aux exigences de tâches étendues en matière de dessin, 3D, informations spectrales, propriétés physico-chimiques et programmation client. ChemWindow peut faciliter les utilisateurs qui s'étendent sur le laboratoire de chimie et la conception de processus d'ingénierie.

Bibliographie

- analyticalansw. (2016, octobre 12). *The Importance of Chemical Structure*. Retrieved from analytical answers: <https://analyticalanswersinc.com/importance-chemical-structure/>
- Chandrasegaran, A., Treagust, D., & Mocerino, M. (2008). *An evaluation of a teacher intervention to promote students' ability to use multiple levels of representation when describing and explaining chemical reactions*. Research in Science Education.
- David A, E. (2014). *History of the Harvard ChemDraw Project*. Angew. Chem. Int. Ed.
- digitalschool. (n.d.). *CAD: A Brief History*. Retrieved from digitalschool.ca: <https://www.digitalschool.ca/cad-a-brief-history/?fbclid=IwAR0ML5izWSRgi1ZbbW1pCzi7Bm3H-cRYGbb8vU5HGtbBhQRRg2c0BuQUF80>
- Eller, G. (2006). *Improving the quality of published chemical names with nomenclature software*. Molecules.
- Hinton, M., & Nakhleh, M. (1999). *Students' microscopic, macroscopic, and symbolic representations of chemical reactions*. Ceem. Educator.
- Jim X, C. (2009). *Guide to Graphics Software Tools*. Springer-Verlag London Limited.
- JK, G. (2005). *isualization: A metacognitive skill in science and science education. Visualization in Science Education, Models and Modeling in Science Education*. Springer Netherlands.
- Obumnenye, O., & Ahiakwo, M. (2013). *Using stereochemistry models in teaching organic compounds nomenclature: effects on senior secondary students' performance in riversstate of Nigeria*. AJCE.
- Raiyan, J., & Raiyan, A. (2015). *How Chemicals' Drawing and Modeling Improve chemistry teaching in college of education*. World Journal of Chemical Education.

Wu, H. K., & Shah, P. (2004). *Exploring visuospatial thinking in chemistry learning*. Science Education.

Zhenjiang, L., Honggui, W., Shi, Y., & Pingkai, O. (2004). *Personal Experience with Four Kinds of Chemical Structure Drawing Software*. College of Life Science and Pharmaceutical Engineering, Nanjing University of Technology, China.