[Chapitre 1 Etude préalable 2](#_Toc79808563)

[I Cadre général du projet 2](#_Toc79808564)

[I.1 C’est quoi une molécule 2](#_Toc79808565)

[I.2 L'importance de la structure chimique 2](#_Toc79808566)

[I.3 Comment le dessin et la modélisation des structures chimiques améliorent l’enseignement de la chimie dans les universités 2](#_Toc79808567)

[II Etat de l’art 2](#_Toc79808568)

[II.1 Introduction aux logiciels graphiques 2](#_Toc79808569)

[ Brève histoire sur les logiciels graphiques 2](#_Toc79808570)

[ Les pionniers de la CAO 2](#_Toc79808571)

[ La chronologie de la CAO 2](#_Toc79808572)

[II.2 Les logiciels graphiques destinés au dessin chimique 2](#_Toc79808573)

[II.3 ChemDraw, leader des logiciels de dessin chimique 2](#_Toc79808574)

[ La vie avant ChemDraw 2](#_Toc79808575)

[ L’histoire de ChemDraw 2](#_Toc79808576)

[ L’intégration de ChemDraw dans l’enseignement 2](#_Toc79808577)

[Bibliographie 2](#_Toc79808578)

[Figure 1 exemple d’un énantiomère 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879624)

[Figure 2 héroïne et morphine 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879625)

[Figure 3 Deux énantiomères de thalidomide 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879626)

[Figure 4 Divers outils de dessin pour la réalisation de structures chimiques 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879627)

[Figure 5 Exemple d'une structure chimique 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879628)

[Figure 6 Exemple d'une structure chimique avec son nom exact 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879629)

[Figure 7 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879630)

[Figure 8 Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C5H12 et prédire leur point d'ébullition. 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879631)

[Figure 9 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) 2](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc79879632)

# Etude préalable

## Cadre général du projet

### C’est quoi une molécule

Une molécule, un groupe composé de deux atomes ou plus, forme la plus petite unité reconnaissable, qui peut diviser une substance pure en une seule tout en conservant la composition et les propriétés chimiques de la substance.

Diviser un échantillon de matière en parties de plus en plus petites ne modifie pas sa composition ou ses propriétés chimiques jusqu'à ce qu'il atteigne une partie composée de molécules individuelles. La subdivision supplémentaire de la substance donne des parties plus petites, qui diffèrent généralement par leur composition et leurs propriétés chimiques de la substance d'origine. Dans la dernière étape de la scission, les liaisons chimiques de la molécule qui maintiennent les atomes ensemble sont rompues.

Un atome est constitué d'un seul noyau chargé positivement entouré d'un nuage d'électrons chargés négativement. Lorsque les atomes sont proches les uns des autres, le nuage d'électrons interagira entre eux et avec le noyau. Si cette interaction réduit l'énergie totale du système, les atomes se réuniront pour former une molécule. Par conséquent, structurellement parlant, les molécules sont composées d'agrégats d'atomes maintenus ensemble par la valence.

### L'importance de la structure chimique

Dans le monde chimique, la structure peut signifier littéralement la différence entre la vie et la mort. Dans de nombreux composés, de légers changements structurels ou la sélection de différents énantiomères peuvent faire passer le composé d'un médicament utile à un médicament dangereux. C'est pourquoi les chimistes connaissent toujours très bien la structure exacte et certains énantiomères et leurs effets biologiques spécifiques, car cette information est très importante pour déterminer les effets biologiques des composés, bons ou mauvais !

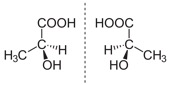
Tout d'abord, commençons par un court cours de chimie. La structure chimique détermine la géométrie moléculaire d'un composé en décrivant la disposition spatiale des atomes et des liaisons chimiques dans la molécule. Cela fournit aux chimistes une représentation visuelle importante d'une formule chimique. 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 exemple d’un énantiomère

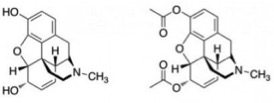
Maintenant que nous avons les connaissances de base nécessaires, nous pouvons discuter des raisons pour lesquelles les énantiomères et les structures sont si importants dans le monde de la chimie. Commençons cette discussion par un jeu de devinettes. Vous trouverez ci-dessous des images de deux composés 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. Pouvez-vous dire lequel est lequel ?

Figure héroïne et morphine

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.

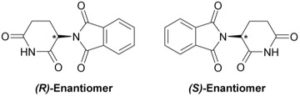
De même, différents énantiomères peuvent produire des effets biologiques très différents du même composé. Un exemple de ceci est la thalidomide. La thalidomide était utilisée comme médicament contre les nausées matinales pour les femmes enceintes dans les années 1950. Ce n'est que des années plus tard que l'utilisation de la thalidomide a été liée à de graves malformations congénitales et rappelée. 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 Deux énantiomères de thalidomide

Les deux énantiomères de la 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 de la 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 la thalidomide ait été rapidement rappelée après sa découverte, elle est encore utilisée aujourd'hui pour traiter des choses 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)

### 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 a) le niveau macroscopique (visible/phénomènes touchables), b) le niveau microscopique (atomique/moléculaire), et c) le niveau symbolique (représentant la matière en termes de formules et équations) (Hinton & Nakhleh, 1999). Étudiants qui étudient la chimie est censée 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 chi mie. Les éducateurs scientifiques ont proposé plusieurs solutions pour surmonter ces difficultés, telles que : l’intégration d’outils de visualisation tridimensionnelle ; promotion du passage entre différents produits chimiques représentations (Wu & Shah, 2004).

Les chercheurs ont constaté que l’intégration visuelle des représentations telles que les modèles moléculaires informatisés, simulations, et des animations dans l’enseignement peuvent promouvoir la compréhension par les étudiants des phénomènes inobservables scientifique, et leur donner la possibilité de rendre visibles les concepts abstraits. Manipulation de produits chimiques structures en représentations 2D/3D aident les étudiants à se relier macroscopique, microscopique et symbolique les niveaux de représentation des substances chimiques entre elles 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 développé 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 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 |

## Etat de l’art

### 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 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 programme 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 les 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 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 énorme bond 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.).

### Les logiciels graphiques destinés au dessin chimique

Le logiciel de dessin de structure chimique est spécialisé dans l’information structurelle 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 développé 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 la structure moléculaire tridimensionnelle et la conversion de la structure moléculaire du bidimensionnel au tridimensionnel (2D à 3D) ont été irréalisable 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 utilisé indépendamment. De puissants logiciels autonomes tels comme ChemDraw et ChemWindow sont membres d’une suite commerciale (Zhenjiang, Honggui, Shi, & Pingkai, 2004).

### 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 « Lerroy Lettering » étaient invariablement utilisés pour produire des dessins à l'encre de Chine sur vélin, un papier de qualité parchemin (*Figure 4*). Ces ensembles fourni 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'aventurait 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).

#### L’histoire de ChemDraw

Figure Divers outils de dessin pour la réalisation de structures chimiques

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 Macintosch 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 matière 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 :

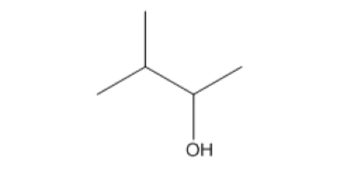


Figure Exemple d'une structure chimique

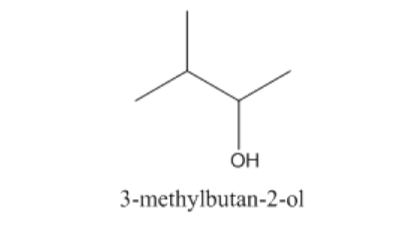
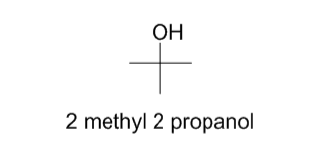
Et plus tard en cliquant sur l'icône "convertir la structure en nom". Cela donne :

Figure 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

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) :

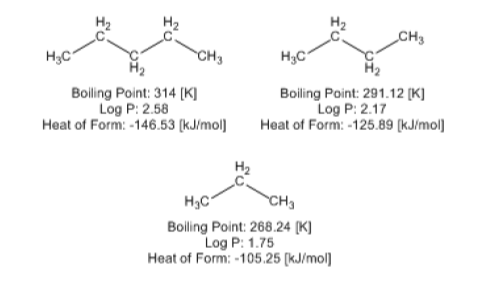
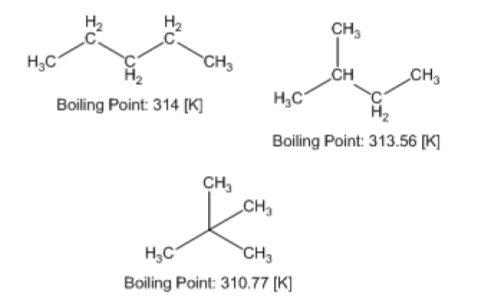
Ainsi que la relation entre le degré de branche dans les alcanes et point d'ébullition :

Figure 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)

Figure Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C5H12 et prédire leur point d'ébullition.

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 qu’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 structure bidimensionnelle en une structure tridimensionnelle d’une molécule en mouvement (différents conformères ayant différents types d'interactions, conduisant à différentes énergies et stabilités) :

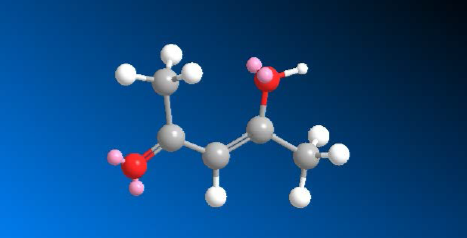
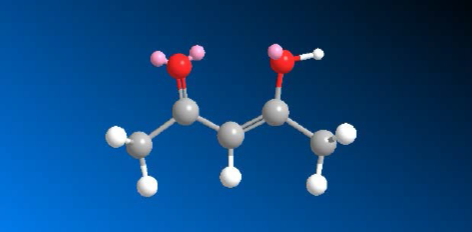
L'énergie totale est égale à 3,7 kcal/mole. Intramoléculaire la liaison hydrogène n'existe pas. Le donneur de protons est loin de l'accepteur de protons. Cela vaut la peine d'attribuer celui-là des conditions cruciales pour faire la liaison hydrogène l'interaction disponible est que la distance entre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

Figure conformateur minimisé no. 1

Figure 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 telles que :

• 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 2e 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 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 structurer | 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 |

#### Commentaires 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. Les commentaires des étudiants à la suite de l'initiative ont été positif et très encourageant. La plupart des étudiants ont déclaré que 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).

# 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.

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.

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.