Tables des matieres

[Chapitre 1 Cadre général du projet 4](#_Toc81086157)

[I La représentation graphique des molécules 5](#_Toc81086158)

[II Définition de molécule 7](#_Toc81086159)

[III L'importance de la structure chimique 7](#_Toc81086160)

[IV Comment le dessin et la modélisation des structures chimiques améliorent l’enseignement de la chimie dans les universités 10](#_Toc81086161)

[Chapitre 2 Etude de l’existant 13](#_Toc81086162)

[I Dessin assisté par ordinateur (DAO) 14](#_Toc81086163)

[I.1 Introduction 14](#_Toc81086164)

[I.2 L’évolution des techniques de dessin 14](#_Toc81086165)

[I.3 Définition du DAO 15](#_Toc81086166)

[I.4 Les logiciels de DAO 15](#_Toc81086167)

[II Les logiciels de DAO destinés au dessin chimique 17](#_Toc81086168)

[III ChemDraw, leader des logiciels de dessin chimique 18](#_Toc81086169)

[III.1 La vie avant ChemDraw 18](#_Toc81086170)

[III.2 L’histoire de ChemDraw 19](#_Toc81086171)

[III.3 L’intégration de ChemDraw dans l’enseignement 20](#_Toc81086172)

[III.4 Les résultats de l’intégration de ChemDraw dans l’enseignement 23](#_Toc81086173)

[III.5 L’avis des étudiants 25](#_Toc81086174)

[IV Examiner quatre types de logiciels de dessin chimique : ChemDraw, ChemWindow, ISIS/Draw et ChemSketch 26](#_Toc81086175)

[IV.1 Présentation 26](#_Toc81086176)

[IV.2 Utilisation 28](#_Toc81086177)

[IV.3 Installation 28](#_Toc81086178)

[IV.4 Dessin chimique primaire 28](#_Toc81086179)

[IV.5 Dessin à main levée de la structure chimique 29](#_Toc81086180)

[IV.6 Dessin avec des modèles et préréglage 29](#_Toc81086181)

[IV.7 Déduction 32](#_Toc81086182)

[Bibliographie 33](#_Toc81086183)

Liste des Figures

[Figure 1 Formules chimiques de molécules organiques 5](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086139)

[Figure 2 La représentation de Cram 6](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086140)

[Figure 3 La projection de Fischer 6](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086141)

[Figure 4 exemple d’un énantiomère 8](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086142)

[Figure 5 structure chimique de la morphine et de l’héroïne 8](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086143)

[Figure 6 Deux énantiomères du thalidomide 9](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086144)

[Figure 7 Classe de dessin début des années 70 14](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086145)

[Figure 8 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 19](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086146)

[Figure 9 Exemple d'une structure chimique 20](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086147)

[Figure 10 Exemple d'une structure chimique avec son nom exact 21](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086148)

[Figure 11 Exemple de conversion de nom à structure 21](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086149)

[Figure 13 Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C5H12 et prédire leur point d'ébullition. 22](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086150)

[Figure 12 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) 22](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086151)

[Figure 14 conformateur minimisé no. 1 23](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086152)

[Figure 15 conformateur minimisé no. 2 23](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086153)

[Figure 16 Les différentes liaisons disponibles dans chaque logiciel 29](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086154)

[Figure 17 Exemple de modèle (Template) dans le logiciel 30](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086155)

[Figure 18 Rétro synthèse du taxol par le groupe Nicolaou 30](file:///D:\youcef\PFE\Projet\Mémoire\Mémoire.docx#_Toc81086156)

**Liste des tableaux**

[Tableau 1 Liste des éditeurs de dessin chimique et de modélisation fonctionnant sur Windows 12](#_Toc80833073)

[Tableau 2 Les logiciels de DAO 16](#_Toc80833074)

[Tableau 3 Comment l'intégration du logiciel CHEMDRAW dans l'enseignement de la chimie affecte-t-elle les résultats des étudiants aux examens [ET = Ecart-Type] 25](#_Toc80833075)

[Tableau 4 Bref résumé et comparaison des quatre types de logiciels chimiques 27](#_Toc80833076)

[Tableau 5 Caractéristiques fonctionnelles des quatre types de logiciels chimiques 31](#_Toc80833077)

# Chapitre 1 Cadre général du projet

## La représentation graphique des molécules

La chimie est l'étude expérimentale et théorique des matériaux sur leurs propriétés aux niveaux macroscopique et microscopique. Comprendre la relation entre les propriétés et les structures/la liaison est également une quête brûlante.

La représentation des molécules est utilisée en chimie pour décrire les propriétés et les structures possibles des molécules, puis pour décrire d'autres substances chimiques. Ces formules et représentations graphiques peuvent exprimer plus ou moins complètement le nombre et les types d'atomes qui composent une espèce chimique, les liaisons entre les atomes et la forme de l'espace. Plus précisément, il est utilisé en chimie organique et en biochimie.

Différents termes sont utilisés pour désigner les représentations graphiques de molécules : on parle ainsi de [formule brute](http://www.chimiegenerale.com/formule_brute.php), de représentation de Cram ou de projection de Fischer.

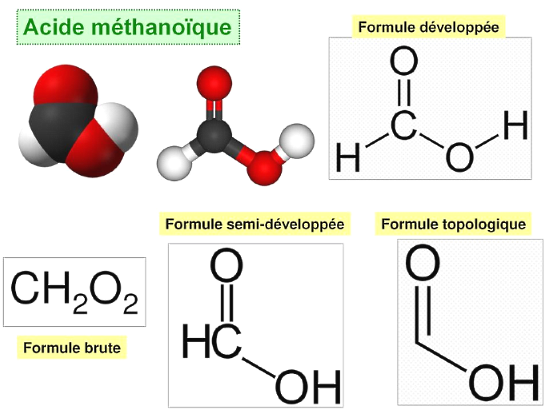
* Les formules sont utilisées pour décrire le nombre et le type d'atomes dans la molécule (formule brute), montrer comment ils sont liés entre eux (formule développée, semi-développée, topologique…). Les formules servent en particulier à représenter simplement et sommairement les molécules et sont par conséquent fréquemment utilisées dans les équations chimiques.

Figure 1 Formules chimiques de molécules organiques

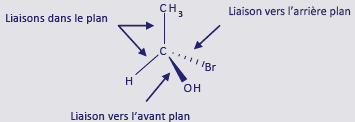
* La représentation de Cram sert à décrire directement la structure tridimensionnelle d'une molécule, par un schéma qui sert à visualiser la molécule telle qu'elle existe dans l'espace. Nous nous appuierons sur cette représentation pour réaliser notre projet.

Figure 2 La représentation de Cram

* Les projections de molécules ne les représentent pas directement : les molécules sont projetées et aplaties sur deux dimensions (une feuille) de différentes manières selon la projection employée. Elles permettent de représenter indirectement des parties de molécules telles qu'elles existent dans l'espace en appliquant des règles strictes de projection (Wikipedia, 2021).

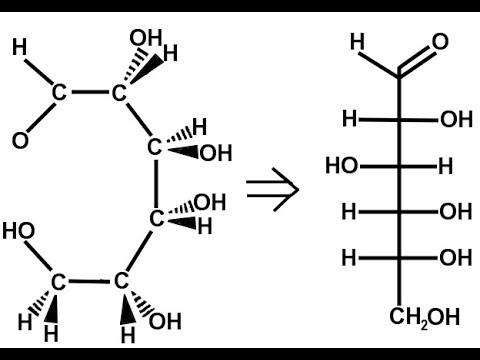


Figure 3 La projection de Fischer

## Définition de 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 (CH4), présente une forme tétraédrique. En revanche, une molécule qui présente quatre liaisons covalentes dont une triple, comme l'acétylène (C2H2), sera de forme linéaire. L'objectif étant de minimiser les forces de répulsions entre doublets (Sciences, s.d.).

## 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.

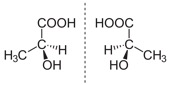
La structure chimique détermine la géométrie moléculaire d'un composé en décrivant la disposition spatiale des atomes et des liaisons chimiques dans la molécule. Cela fournit aux chimistes une représentation visuelle importante d'une formule chimique. Les énantiomères sont des molécules chirales qui 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 4 exemple d’un énantiomère

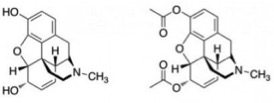
Maintenant que nous avons les connaissances de base nécessaires, nous pouvons discuter des raisons pour lesquelles les énantiomères et les structures sont si importants dans le monde de la chimie. Commençons cette discussion par un jeu de devinettes. On peut observer ci-dessous des images de deux composés différents avec des structures légèrement différentes. Comme on peut 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, et couramment utilisé à des fins récréatives.

Figure 5 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.

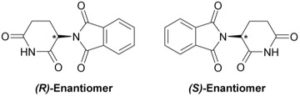
De même, différents énantiomères peuvent produire des effets biologiques très différents du même composé. Un exemple de ceci est le thalidomide. Le thalidomide était utilisée comme médicament contre les nausées matinales pour les femmes enceintes dans les années 1950. Ce n'est que des années plus tard 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 6 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. (analytical answers, 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 : 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 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 différents 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 composés 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 étudiants 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 et les enseignants pour dessiner des structures chimiques pour des publications/présentations et pour interroger des bases de données chimiques. Dans la plupart des établissements universitaires, le logiciel est utilisé pour dessiner des composés 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 1 Liste des éditeurs de dessin chimique et de modélisation 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 |

# Chapitre 2 Etude de l’existant

## Dessin assisté par ordinateur (DAO)

### Introduction

Le DAO désigne l’activité consistant à établir des plans, ce qui autrefois et encore aujourd’hui dans les bureaux d’études où l’on retouche d’anciens «projets» non encore numérisés, se faisait sur une planche à dessin, à l’aide de la règle, de l’équerre, du crayon et du compas. Il s’agit dans ce cas-là de dessin traditionnel ou de dessin aux instruments, sous-entendu dessin technique. En DAO, le matériel et le programme informatique ont remplacé les outils habituels et historiques, mais l’objectif et le résultat sont identiques.

### L’évolution des techniques de dessin

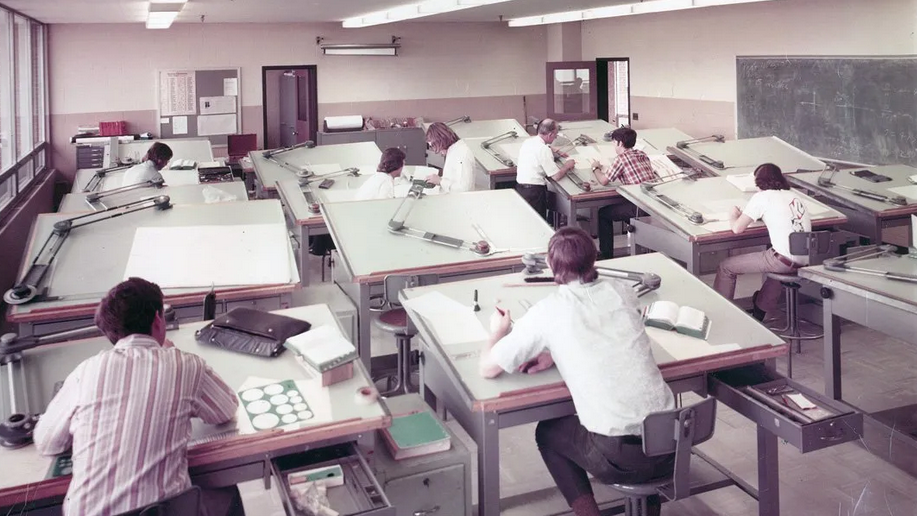
Les techniques de dessin ont évolué de façon extraordinaire au cours de ce siècle et plus encore, au cours des dernières décennies.

Figure 7 Classe de dessin début des années 70

Le dessin classique "à main-levée" et le Dessin Assisté par Ordinateur (DAO) ont bien en commun le terme "dessin". Il s'agit, dans les deux cas, de dessiner.

Le Dessin Assisté par Ordinateur n'a donc pas pour prétention de remplacer le dessin de conception. Il le complète dans les tâches délicates. Il est un outil d'aide à la production de dessins de communication, où la communication est prise ici dans le sens de "la transmission d'informations sous forme de plans". Ses avantages sont nombreux, du point de vue de la communication, mais aussi pour la pratique de l'utilisateur, la visualisation des plans et l'exploitation des informations graphiques. (Anne, 2004)

### Définition du DAO

Le dessin assisté par ordinateur (DAO) est une discipline permettant de produire des dessins techniques avec un logiciel informatique. On le distingue de la synthèse d'image dans la mesure où il ne s'agit pas du calcul de rendu d'un modèle numérique, mais de l'exécution de commandes graphiques (traits, formes diverses...). De ce fait, en DAO, la souris et le clavier remplacent le crayon et les autres instruments du dessinateur.

Les dessins produits sont le plus souvent réalisés en mode vectoriel (traits cohérents), alors que l'image de synthèse est une association de pixels indépendants bitmap. En d'autres termes, les logiciels de DAO attribuent des coordonnées (X,Y pour les plans 2D et X,Y,Z pour les modèles 3D). Chaque élément d'un dessin est appelé entité, et chaque entité contient donc des propriétés de couleur, d'épaisseur, de calque, de type de ligne, etc.

L'intérêt de la DAO est d'abord celui de l'informatique, c’est-à-dire essentiellement un apport de praticabilité dans la gestion des documents, facilitant l'édition de modifications, l'archivage, la reproduction, le transfert de données, etc. (Wikipédia, 2021)

### Les logiciels de DAO

Le DAO comprend l’ensemble des programmes et des techniques de modélisation qui permettent la création des plans. Il existe autant de logiciels de DAO que de métiers utilisant le dessin. Le mécanicien, l'architecte, mais aussi l'électricien et le chimiste disposent aujourd'hui d'outils facilitant la création d'un plan, d'un schéma, avec des commandes orientées métiers, des bases de données adaptées, comme par exemple : Adobe Illustrator, CorelDraw, Sketch, AutoCAD etc.

Tableau 2 Les logiciels de DAO

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Nom | Éditeur | Licences | Politique commerciale | Date de la première édition | Dernière version | Systèmes d'exploitation |
| Adobe Illustrator | Adobe | Propriétaire | Payant (annuel) | 1986 | 2019 | Mac OS/ Windows |
| Macromedia FreeHand | Macromedia | Propriétaire | Payant | 2003 | 2013 | Mac OS/ Windows |
| CorelDraw | Corel | Propriétaire | Payant | 1992 | 2017 | Mac OS/ Windows |
| Inkscape | RECIF | Libre | Gratuit | 2003 | 2019 | Linux / Mac OS/ Windows |
| Drawplus | Serif | Propriétaire | Payant | 1993 | 2013 | Windows |
| Sketch | Bohemian Coding | Propriétaire | Payant | 2010 | 2021 | Mac OS |
| ArtPro | Esko | Propriétaire | Payant | 1992 | 2013 | Mac OS |
| Denis Draw | BeeLog | Propriétaire | Gratuit | 1992 | 2015 | Windows |
| AutoCAD | Autodesk | Propriétaire | Payant | 1982 | 2021 | Mac OS/ Windows |
| Affinity Designer | Affinity | Propriétaire | Payant | 2012 | 2018 | Mac OS/ Windows |

## Les logiciels de DAO 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 se sont 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 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 spécialistes 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 que 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 eensembles 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 8*). Ces ensembles fournissent une collection de modèles de différentes tailles de police. Les lettres en gras et en italique exigeaient chacune le modèle et le stylo requis. Le stylo spécialisé facilite 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 8*). C'était le rare étudiant qui s'aventurait dans ce domaine de complexité technique en raison de l'engagement de temps. En général, les étudiants 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 incurvées 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 8 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

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 chimie organique. Les étudiants rencontrent des difficultés d'apprentissage de la 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).

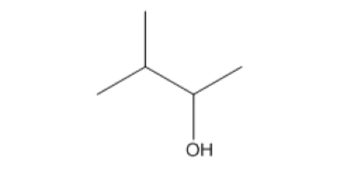
Ici, nous donnons quelques exemples pratiques : Nous dessinons la structure chimique suivante :

Figure 9 Exemple d'une structure chimique

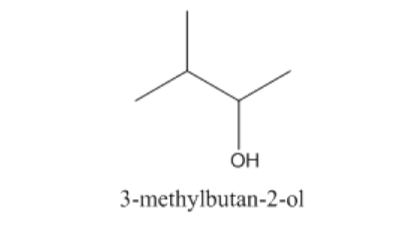
Et plus tard en cliquant sur l'icône "convertir la structure en nom". Cela donne :

Figure 10 Exemple d'une structure chimique avec son nom exact

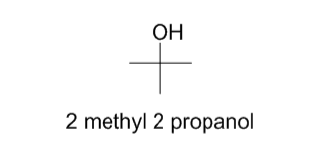
Nous pouvons également convertir des noms en structures. Quand nous cliquons sur l'icône pour convertir le nom en structure et que nous tapons "2 méthyl 2 propanol" cela donne :

Figure 11 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 12*). 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) :

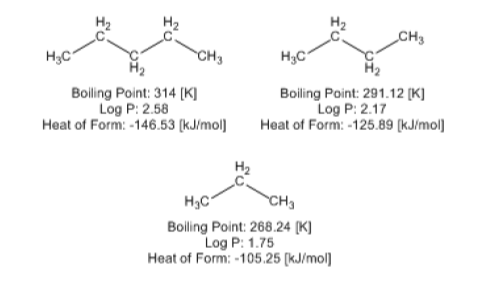
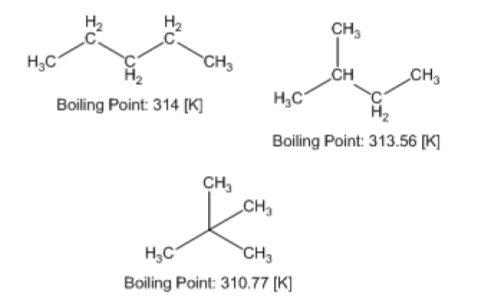
Ainsi que la relation entre le degré de branche dans les alcanes et point d'ébullition :

Figure 12 Dessin des structures 2D de différents isomères d'alcane avec formule moléculaire C5H12 et prédire leur point d'ébullition.

Figure 13 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) :

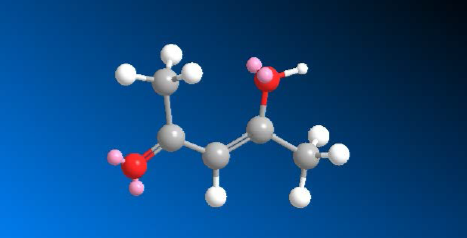
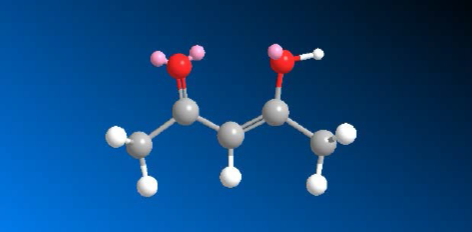
L'énergie totale est égale à 3,7 kcal/mole. Intramoléculaire la liaison hydrogène n'existe pas. Le donneur de protons est loin de l'accepteur de protons. Cela vaut la peine d'attribuer ceci à des conditions cruciales pour faire la liaison hydrogène, l'interaction disponible est que la distance entre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

Figure 14 conformateur minimisé no. 1

Figure 15 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 composés chimiques et polarité des composés 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 3* 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 3 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 dans l’enseignement de la chimie 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 composés chimiques par les étudiants (Raiyan & Raiyan, 2015).

## 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 4*.

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 copie de 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 4 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

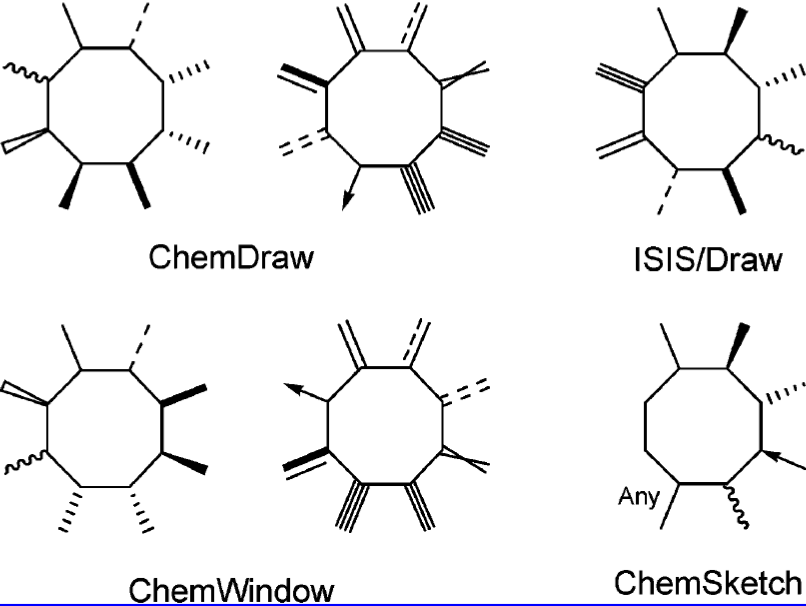
Dessiner des structures et des réactions simples est souvent réalisé à main levée. Dans le dessin d'objets compliqués, le dessin à main levée est indispensable dans la finition et la modification des détails après l'utilisation des modèles. Dans la barre d'outils standard, les outils de liaisons, d'atomes (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 16)*. 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 16 Les différentes liaisons disponibles dans chaque logiciel

### Dessin avec des modèles et préréglage

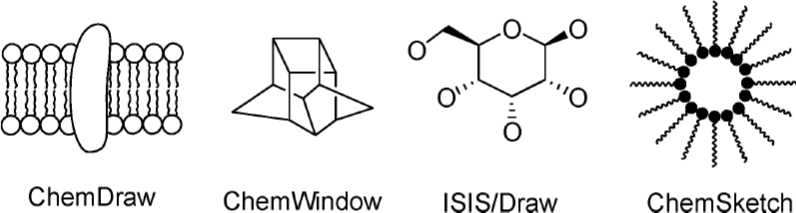
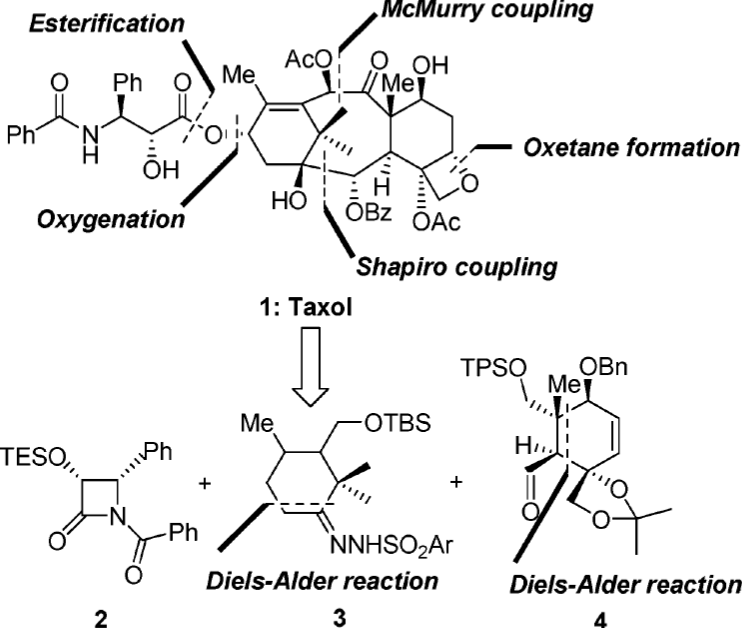
Les modèles de ChemSketch sont les plus puissants et conviviaux. ChemSketch et ChemDraw fournissent des modèles clients. Les deux autres non. Ces dernières situations peuvent être contournées. Dans ISIS/Draw, les modèles doivent être préparés au préalable, enregistrés dans le dossier « Template », puis 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.

Figure 17 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 18*), 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 18 Rétro synthèse du taxol par le groupe Nicolaou

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 5*).

Tableau 5 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 évaluation1,9 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.

# Chapitre 3 Analyse et conception de l’application

## Analyse des besoins et spécification des exigences

### Introduction

La première étape de la conception consiste à établir une analyse des besoins qui est la clé pour définir les exigences clients avant de développer une solution. Cette étape permet d’analyser la situation pour prendre en compte les contraintes, les risques et tout autre facteur pertinent, et s'assurer que le travail ou le processus répond aux besoins du client.

Cette activité nous a permis de bien comprendre le contexte du moment et d’obtenir de l’information supplémentaire permettant d’en élargir les horizons ou de tenir compte des considérations futures. La source principale d’information étant généralement le client lui-même qui est dans notre cas à nous l’université Algérienne, nous n’avons pas hésité à poser des questions pour obtenir des renseignements utiles. Ceux-ci sont parfois si évidents pour le client qu’il n’a tout simplement pas pensé à les mentionner. En parallèle, nous avons cherché l’information supplémentaire en se documentant sur le sujet et en analysons des applications similaires, ChemDraw en particulier.

### Exigences fonctionnelles

Dans cette section, nous représentons toutes les exigences fonctionnelles auxquelles notre application doit répondre. Les exigences fonctionnelles et les attentes associées à notre application dépendent du client. À cette fin, nous décrivons les exigences fonctionnelles liées à ce dernier. Les exigences fonctionnelles auxquelles notre application doit répondre sont résumées dans Les points suivants :

#### Menu

Le système doit contenir un menu regroupant une liste des éléments suivants :

##### Document

L’élément *document* contient une liste d’actions qui permettent à l’utilisateur de : supprimer tous les éléments du Canvas, ouvrir document enregistré, ainsi que de sauvegarder le document actuel.

##### New

L’élément *new* contient une liste d’actions qui permettent à l’utilisateur d’ouvrir un document vierge soit dans la fenêtre actuelle ou bien dans une nouvelle fenêtre.

##### Object

L’élément *document* contient une liste d’actions qui permettent à l’utilisateur d’aligner l’objet sélectionné par rapport au Canvas (à gauche, à droite, centré, haut, bas), et de le faire pivoter.

##### Edit

L’élément *edit* contient une liste d’actions qui permettent à l’utilisateur d’annuler une action (undo), refaire une action (redo), ainsi que de copier, couper, et coller un objet.

#### Barre d’outils

Le système doit contenir une barre d’outils qui se compose des outils de dessin suivant :

##### Cyclopentane

Le cyclopentane est un composé chimique de formule C₅H₁₀. C'est un cycloalcane (alcane cyclique) pentagonal dont deux atomes de carbone sont situés de part et d'autre du plan formé par les trois autres.

##### Cyclohexane

Le cyclohexane est un hydrocarbure alicyclique comprenant un cycle de six atomes de carbone, il a la forme d’un hexagone régulier.

##### Benzène

Le benzène, C6H6, est une molécule plane contenant un cycle de six atomes de carbone, chacun avec un atome d'hydrogène attaché. Les six atomes de carbone forment un hexagone parfaitement régulier. Toutes les liaisons carbone-carbone ont exactement les mêmes longueurs, quelque part entre les liaisons simples et doubles.

##### Cyclopentadiene

## Conception et modélisation du système

Dans cette partie, nous utilisons la modélisation UML pour représenter les spécifications des exigences grâce au diagramme de cas d’utilisation, mais aussi pour analyser le domaine avec le diagramme de classe. Par la suite, nous abordons la conception, d’un point de vue fonctionnel avec le diagramme séquence.

### Diagramme de cas d’utilisation

Nous allons répondre aux questions suivantes : Quels sont les utilisateurs du système ? Quelles sont leurs interactions avec celui-ci ? Il faut donc identifier les différents acteurs ainsi que les cas d’utilisation c’est-à-dire les différentes fonctionnalités du système.

Les acteurs pour notre application de dessin chimique n’est en fait qu’un seul acteur qui représente l’utilisateur de l’application que nous allons lui attribuer le statut de *Chimiste.*

Les principaux cas d’utilisation de l’acteur précédemment identifié, ont été bien mis en évidence dans la partie précédente. Voici donc le diagramme de cas d’utilisation.

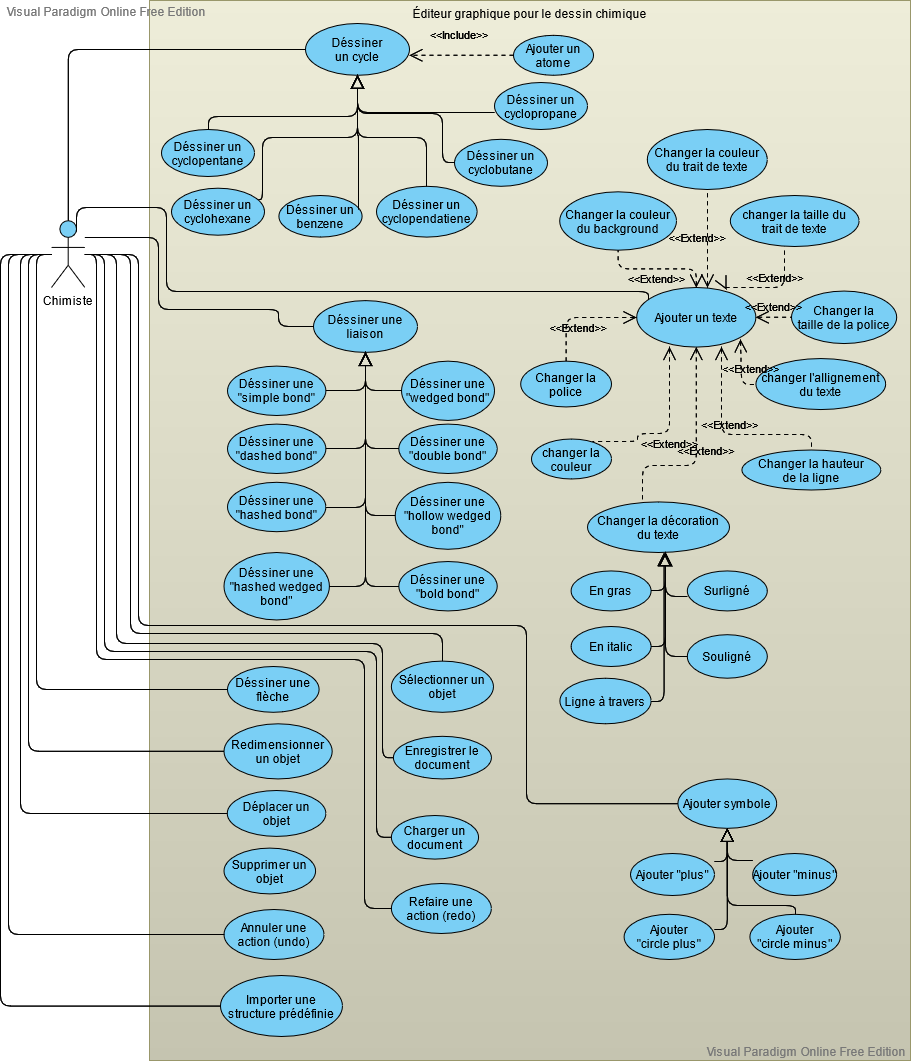


Figure 19 Diagramme de cas d'utilisation

### Diagramme de classe



Figure 20 Diagramme de classe

Dans cette partie, nous décrierons la structure de notre application en modélisant les relations entre les classes, les attributs, les opérations et les objets. Ceci est illustré par le diagramme de classes dans la figure ci-dessus.

Nous tenons à expliquer brièvement ce diagramme a travers les points suivants :

* Les classes qui représentent les différents types de liaisons héritent de la classe Bond.
* La classe Cycle représente les différentes formes de polygone régulier caractérisé par le type et le rayon du polygone, et se compose de la classe Bond et de la classe Atom.
* La classe Toolbar est responsable de stocker l’outil courant.
* La classe Geometry contient des méthodes qui retournent le résultat de différentes équations géométriques, exemple : calculer la distance entre 2 points dans l’espace.
* La bibliothèque *fabric* illustré dans le diagramme de classe par « FabricLibrary » est responsable de la création, la manipulation, et l’affichage des objets graphiques.

### Diagrammes de séquence

# Bibliographie

analytical answers. (2016, octobre 12). *The Importance of Chemical Structure*. Retrieved from analytical answers: https://analyticalanswersinc.com/importance-chemical-structure/

Anne, T. (2004). Le Dessin Assisté par Ordinateur (DAO) dans la formation des ingénieurs. Belgique: Presses universitaires de Louvain,.

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. (s.d.). *CAD: A Brief History*. Récupéré sur 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*.

Sciences, F. (s.d.). *Molécule*. Récupéré sur Futura Sciences: https://www.futura-sciences.com/sciences/definitions/chimie-molecule-783/

Wikipédia. (2021). *dessin assisté par ordinateur*. Récupéré sur Wikipédia: https://fr.wikipedia.org/wiki/Dessin\_assist%C3%A9\_par\_ordinateur

Wikipedia. (2021). *Représentation des molécules*. Récupéré sur wikipedia: https://fr.wikipedia.org/wiki/Repr%C3%A9sentation\_des\_mol%C3%A9cules

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.