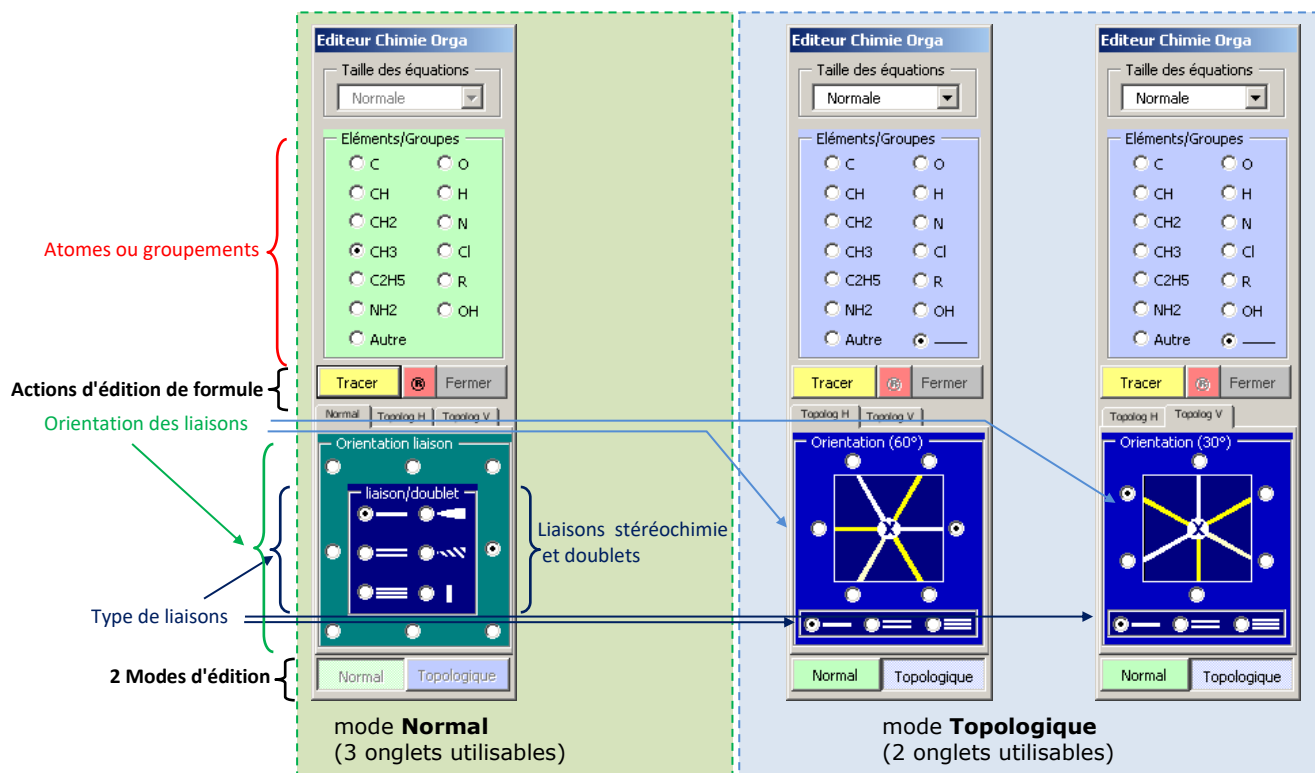


Auteurs : Jean Pierre Gachassin et Denis Grenier
 Lycée Gérard de Nerval Soissons
 denis.grenier@ac-amiens.fr

EDITEUR de formules développées représentation de Lewis, Cram, formules topologiques

Le panneau de choix de l'éditeur

Deux mode d'écriture : le **mode Normal** pour écrire les formules développées ou semi-développées et le **mode Topologique** qui ne présente que le squelette carboné avec éventuellement des éléments ou groupements particuliers

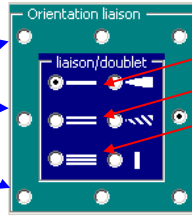


L'édition se fait uniquement à la souris

Comment écrire une formule ?

Utiliser les options prédéfinies

20 orientations de liaisons
prédéfinies
dans les 3 onglets

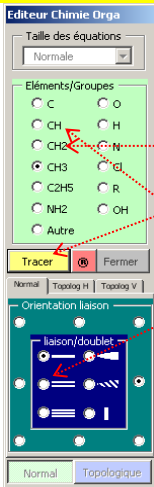


3 types de liaisons covalentes



L'édition se fait directement dans le document de travail. La formule se construit progressivement à partir de la position du pointeur de texte dans le document..

- Chaque clic sur le bouton **Tracer** entraîne le tracé d'une liaison selon l'orientation sélectionnée ET à l'extrémité un atome ou un groupement. (le premier clic n'écrit qu'un groupement ou atome)
- En cours d'édition si on déplace le pointeur dans une boite contenant un groupement on amorce alors une ramification (exemple expliqué plus loin pas à pas)
- le bouton **Fermer** au final regroupe et assemble la formule. On déplacera alors la formule, si nécessaire.
- Pendant l'édition : en cas d'erreur, le bouton **annule à chaque clic, le dernier tracé**. On remonte ainsi dans le temps.

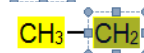


Mode Normal : Un petit essai juste pour voir comment ça marche :

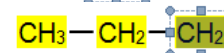
premier clic Tracer --- Tracer



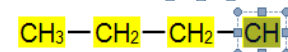
choisir CH₂ et clic Tracer



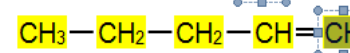
clic Tracer



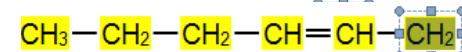
choisir CH et clic Tracer



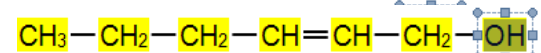
choisir liaison double et clic Tracer



choisir CH₂ et clic Tracer

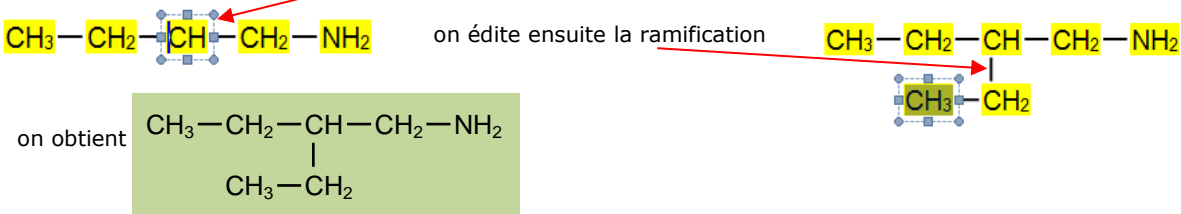


choisir OH et clic Tracer

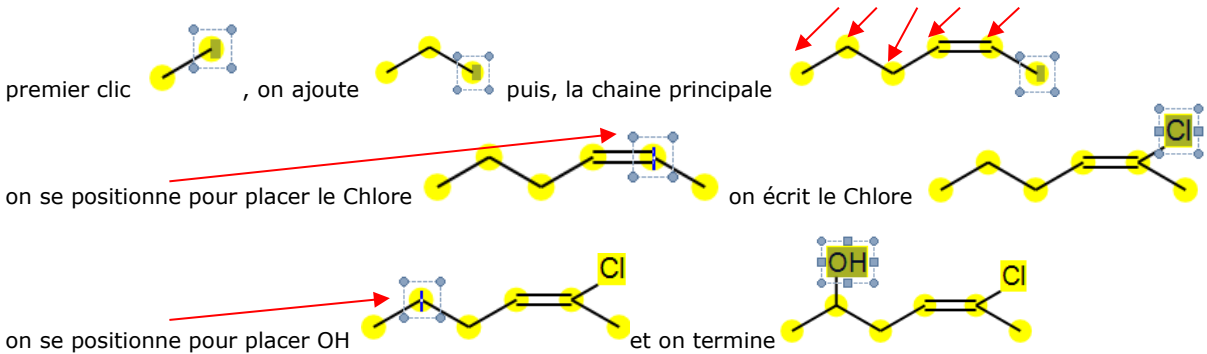


clic Fermer. La formule dans le document est : $CH_3-CH_2-CH_2-CH=CH-CH_2-OH$

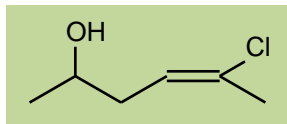
Ramification : les parties sur fond jaune sont les zones à sélectionner pour éditer une ramification. Après avoir écrit la chaîne principale on pointe une zone de ramification.



Mode Topologique : La méthode est la même sauf que pendant l'édition les zones de ramifications sont les disques jaunes :



Fermer et au final dans le document on obtient









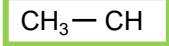
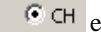

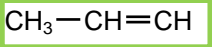
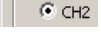
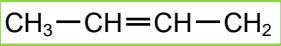


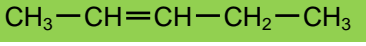
NB le programme ne contrôle pas la validité de la formule éditée

Méthode d'édition des formules semi-développées sans ramification :

Principe de l'édition

- Etape 1 sélectionner le type de liaison, l'orientation de la liaison, le groupement, Etape 2 cliquer **Tracer**
- Répéter les deux étapes précédentes ...

Exemple : écriture de la molécule

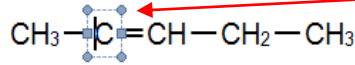
- 1) sélectionner CH₃  Orientation horizontale à droite  liaison simple 
- 2) clic Tracer on obtient 
- 3) sélectionner CH  et simple liaison 
- 4) clic Tracer on obtient 
- 5) sélectionner CH  et liaison double 
- 6) clic Tracer on obtient 
- 7) sélectionner CH₂ 
- 8) clic Tracer on obtient 
- 9) sélectionner CH₃  liaison simple 
- 10) clic Tracer puis fermer on obtient 



Méthode d'édition des formules semi-développées avec ramification:

Exemple : on veut écrire $\text{CH}_3-\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Commencer par écrire la chaîne principale $\text{CH}_3-\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Ensuite, placer le pointeur de la souris dans la boîte contenant le carbone à "ramifier" comme ci - dessous



Sélectionner  et orientation verticale vers le bas 

Clic Tracer puis Fermer

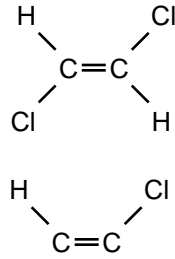
Clic Fermer on obtient 

NB: on peut à partir d'une ancienne formule "greffer" une ramification par la même méthode.

Dans une formule déjà existante, placer le pointeur de souris dans une boîte contenant le carbone à ramifier. Lancer l'éditeur commencer l'édition le programme reconnait et "accroche" la nouvelle édition à la précédente

Méthode d'édition des formules développées :

Exemple : on se propose d'écrire la formule suivante



Commencer par H

Ajouter liaison simple à 45° vers le bas et C

Ajouter liaison double horizontale et C

Ajouter liaison simple à 45° et H

ce qui donne

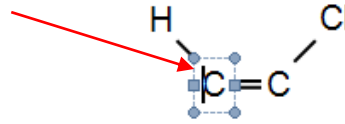
Placer le pointeur de souris sur le premier carbone

un cadre apparaît

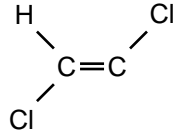
Choisir liaison à 45 vers le bas

Elément Cl

Tracer



ce qui donne



Placer le pointeur de souris sur le deuxième carbone

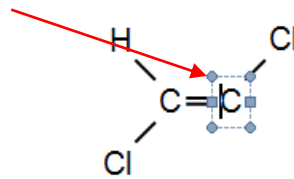
un cadre apparaît

Choisir liaison à 45° vers le bas

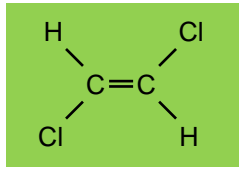
Elément H

Tracer

Fermer



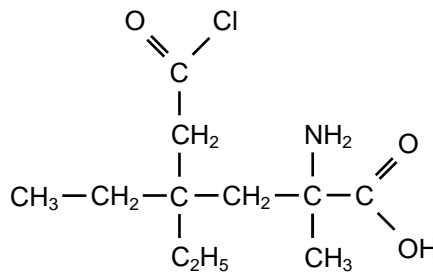
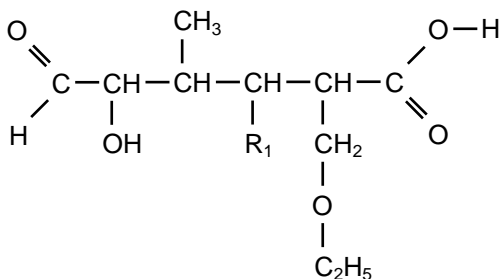
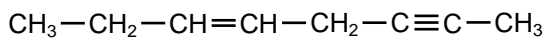
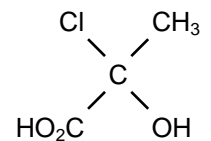
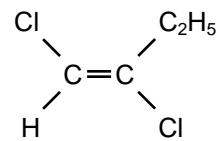
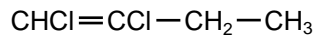
On obtient la formule ainsi enrichie



Rappel : En cas d'erreur pendant l'édition, on peut faire "marche arrière"



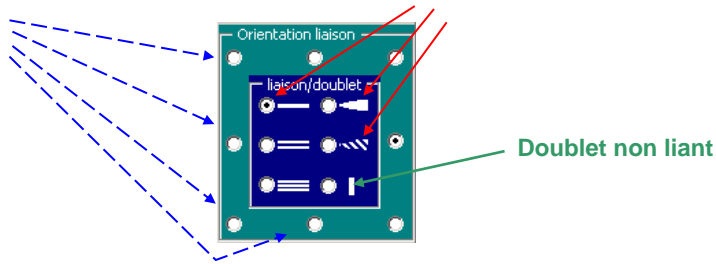
avec et reprendre avec les nouveaux choix

Quelques exemples pour illustrer les possibilités du programme**Écriture de formules semi-développées ou développées**

L'option "Autre" permet d'introduire un groupement personnalisé

Représentation de Cram

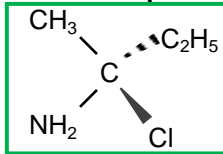
On utilise les **8 orientations prédéfinies** et les **3 types de liaisons** distinctes



Edition des liaisons Avant et Arrière

Principe : commencer par écrire le carbone ou un groupement, puis les liaisons dans le plan, puis les liaisons hors du plan.

Exemples d'édition de molécules pas à pas :



Exemple 1 : La molécule pas à pas

Choisir C et tracer sélectionner CH₃ et liaison montante gauche, tracer , ramener le pointeur sur C ,

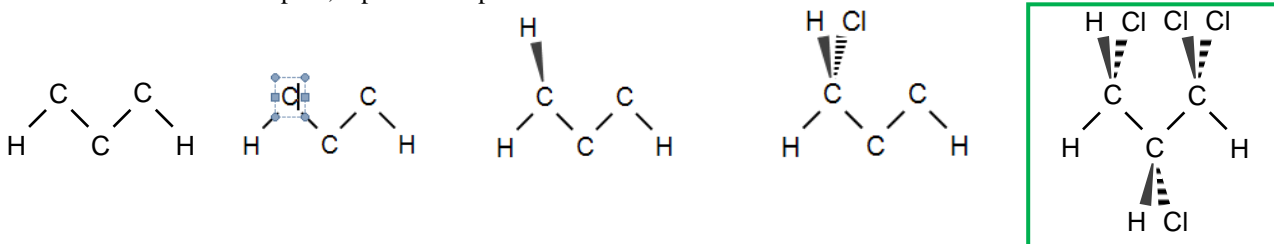
sélectionner NH₂ et liaison descendante gauche, tracer , ramener le pointeur sur C , sélectionner C₂H₅, liaison

vers l'arrière du plan, orientation montante droite et tracer , sélectionner Cl, liaison vers l'avant du plan, orientation

descendante droite et tracer fermer la molécule est construite

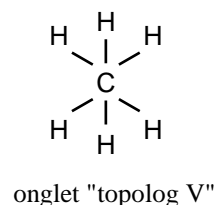
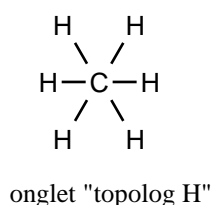
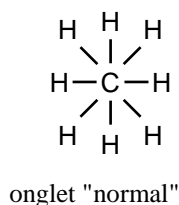
Exemple 2 la molécule 1,1,2,3 tétra-chloro propane

Commencer par écrire la chaîne formée par partie dans le plan, positionner ensuite le pointeur de souris sur le premier carbone et tracer une liaison hors du plan, répéter ainsi pour les autres liaisons

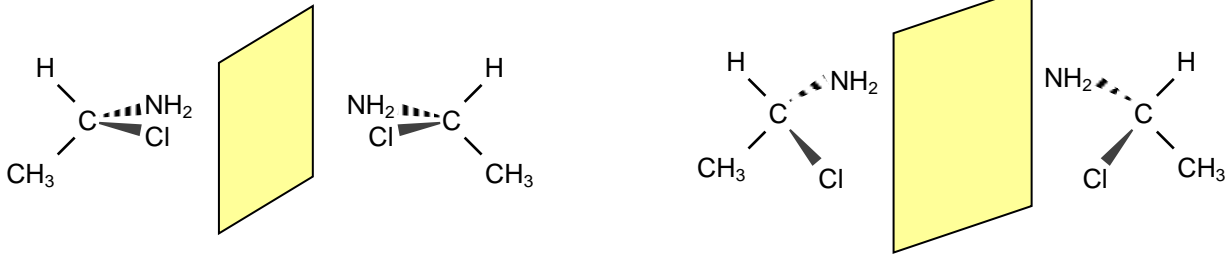


Exemples :

ci-dessous, on a dessiné toutes les orientations possibles et types liaisons regroupées sur une même carbone



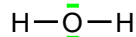
Exemple représentation d'isomères :



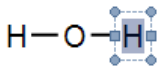
Écriture des doublets non liants

Pour tracer un doublet, sélectionner l'élément chimique choisir l'option "doublet" puis choisir une orientation.

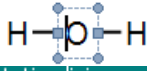
Tracé pas à pas de la molécule d'eau



Commencer par éditer ceci



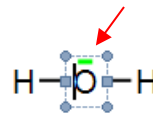
Placer le pointeur sur l'oxygène



Choisir doublet et vertical

cliquer Tracer ,

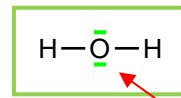
ce qui donne :



Choisir doublet et vertical

cliquer Tracer puis Fermer,

ce qui donne :

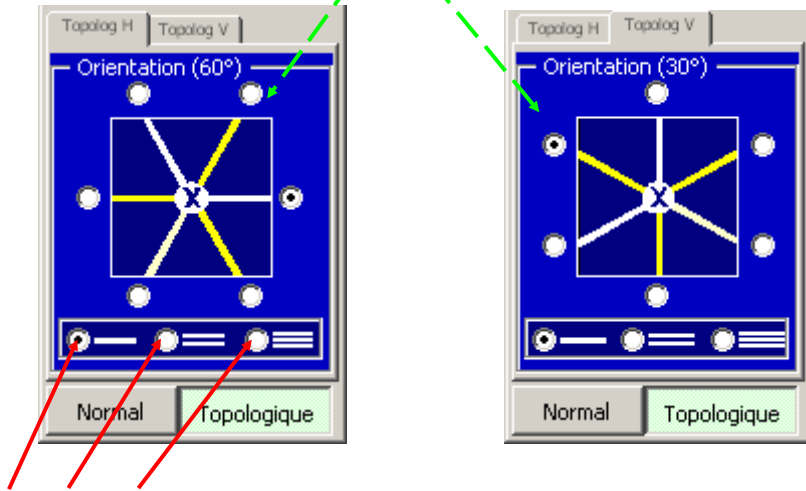


Autres exemples :



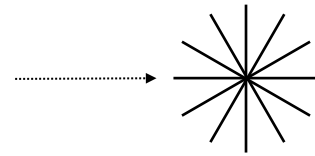
Formules topologiques

On utilise les **12 orientations prédéfinies** (60° et 30° par rapport à l'horizontale) dans deux volets

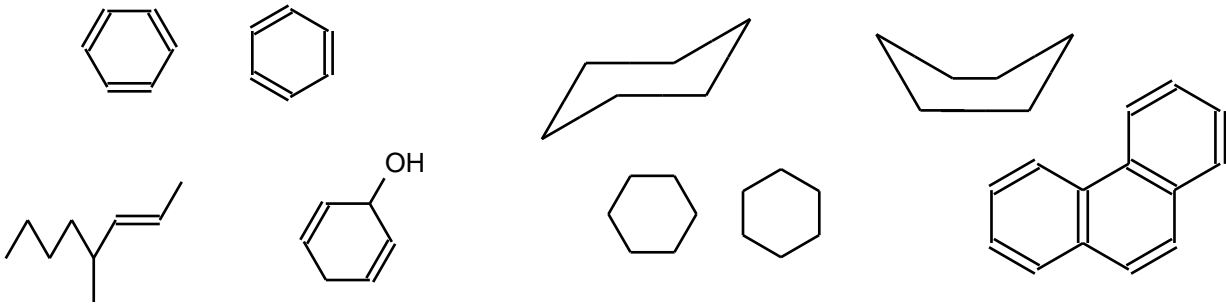


3 types de liaisons

Le choix des orientations permet d'écrire des molécules complexes
Ici on a tracé toutes les orientations possibles à partir d'un même carbone

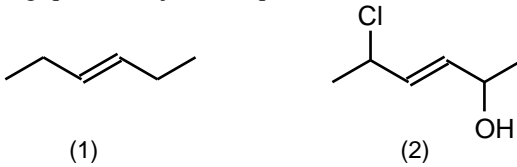


Exemples :



On peut rajouter une ramification à une molécule existante. On clique le carbone de la molécule que l'on doit ramifier, on appelle l'éditeur mode topologique et on ajoute ce qu'on veut

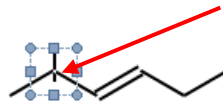
Exemple :



On édite (1) pour obtenir (2).

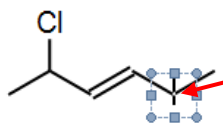
Méthode :

Sélectionner le carbone de ramification de la formule 1 en pointant la souris à la jonction de deux liaisons



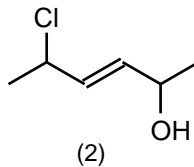
Ajouter Cl ce qui donne

Sélectionner le deuxième carbone de ramification de la formule en pointant la souris à la jonction de deux liaisons



Ajouter OH

Ce qui donne bien

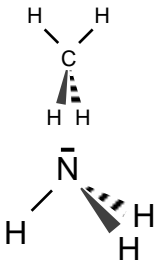
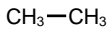


Choix entre 5 tailles prédéfinies :

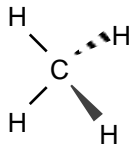
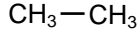
Choisir la taille **avant le début d'édition**. (non modifiable pendant l'édition)

Ce choix définit : la taille de la police de caractère, l'épaisseur des traits, la longueur des liaisons

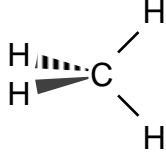
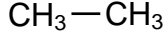
Petite (8)



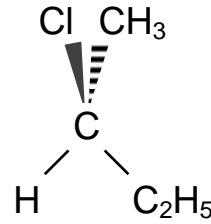
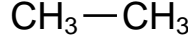
Normale (10)



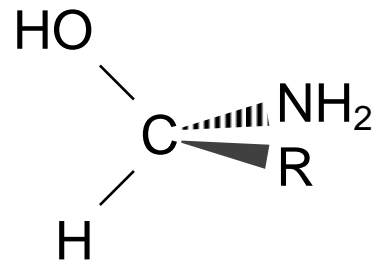
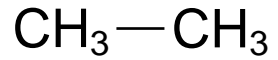
Moyenne (12)



Grande (14)

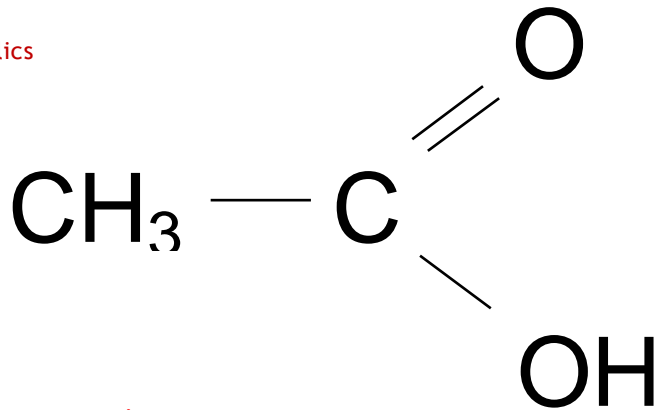
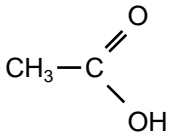


Très grande (20)



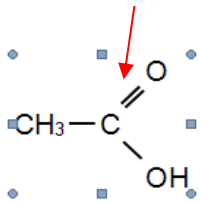
Une formule déjà écrite peut être redimensionnée en 3 clics

Exemple :

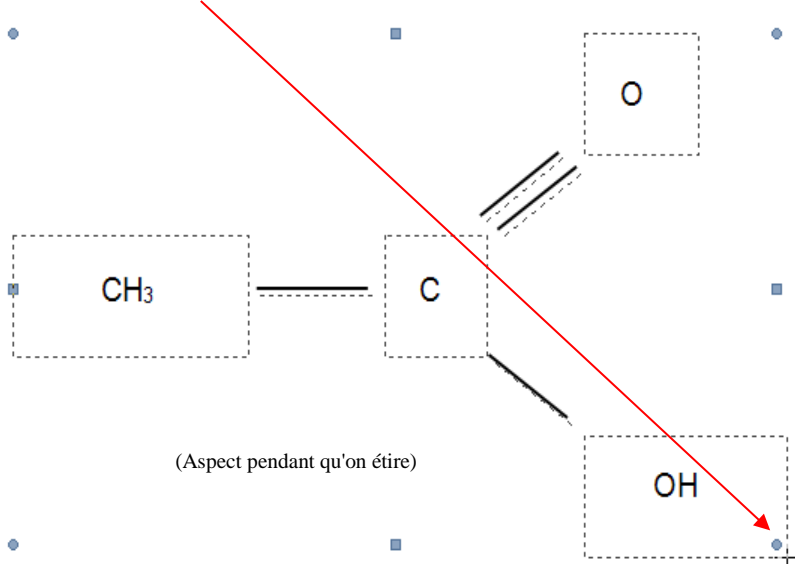


Méthode :

1- sélectionner la formule



2- étirer par les "poignées"



(Aspect pendant qu'on étire)

3 - garder la sélection et changer la taille des caractères

