

Formules chimiques dans
ScienceWord et PagePlayer

Dr Emile C. B. COMLAN

Représentant de Novoasoft en Afrique

Emails:





ecomlan@yahoo.com

ecomlan@scienceoffice.com

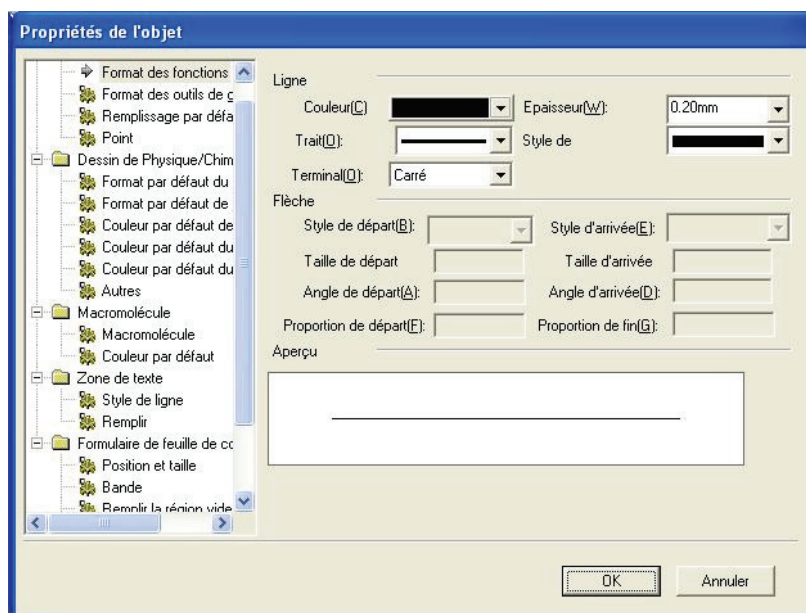
Chapitre V: LES FORMULES CHIMIQUES

1) Généralités

Les formules chimiques sont composées de symboles chimiques (C, O, CH₂, OH, Br), de liaisons chimiques simples sous formes de trait (——— ~~~~~ ≡≡≡ etc.) et

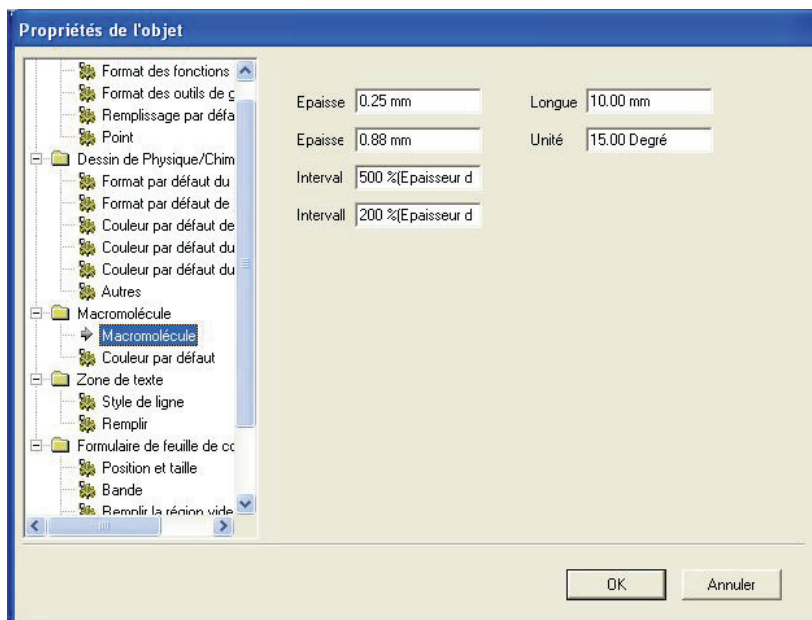
d'autres groupes (    , etc.) que nous désignons par liaisons polygonales.

L'écriture des formules chimiques est simplifiée grâce aux techniques d'insertion des symboles et liaisons chimiques développées dans ScienceWord. Par exemple, les liaisons chimiques simples sont réalisées avec le même geste que nous faisons lorsque nous les dessinons avec un stylo! Aussi, les caractéristiques liées à la réalisation d'une liaison chimique simple peuvent être prédéfinies dans la boîte de dialogue ci-dessous.



Pour accéder à cette boîte de dialogue, cliquez dans le menu "**Format**" sur "**Définir les propriétés par défaut**", puis enfin, dans la boîte "**Propriétés de l'objet**" qui s'ouvre,

sélectionnez "**Macromolécule**" comme le montre l'illustration suivante.



Epaisseur: 0.25 mm se rapporte à l'épaisseur du trait dans une liaison chimique.

Epaisseur: 0.88 mm se rapporte à la taille des lignes verticales dans une liaison de type (.....)

Intervalle: 500% se rapporte à l'espace entre les lignes verticales dans une liaison de type (.....).

Intervalle: 200% se rapporte à l'espace entre les lignes horizontales dans une liaison de type (=====).

Longueur: 10.00 mm se rapporte à la longueur du trait dans une liaison chimique.

Unité: 15° se rapporte à l'angle de rotation d'une poussée rotative d'une liaison chimique simple.


Remarque: on peut prédéfinir aussi la couleur des liaisons chimiques simples à partir du sous- menu "**Couleur par défaut**" du menu "**Macromolécule**".

2) Insertion des liaisons chimiques simples et des symboles chimiques

Chaque liaison simple comporte des zones d'insertion des symboles chimiques. Ces zones sont soit les extrémités de la liaison (dans le cas des liaisons simples) , soit les sommets de la liaison (dans le cas des liaisons polygonales).

a) Insertion des liaisons chimiques simples

i) Suivant une direction régulière

Cliquez par exemple sur la liaison "*Liaison chimique simple*" () de la barre d'outils des Macromolécules. Sur la feuille de travail, le pointeur prend la forme (+) . Cliquez sur la feuille de travail sans lâcher le bouton gauche de la souris. Bougez légèrement la souris dans un mouvement rotatif, le bouton gauche étant maintenu enfoncé, puis remarquez l'apparition d'un trait dont la direction change suivant le mouvement de la souris. La figure ci-dessous en est une illustration.

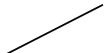


Cette illustration indique en fait, les successions de poussées rotatives de 15° dans le sens positif.


Remarquez que le rayon de la rotation n'a aucune influence sur la longueur de la liaison chimique.

ii) Suivant une direction contrôlée

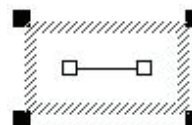
Vous pouvez varier la longueur de la liaison et l'angle de rotation en appuyant la touche "**Alt**"

pendant les poussées rotatives :  .

Remarque

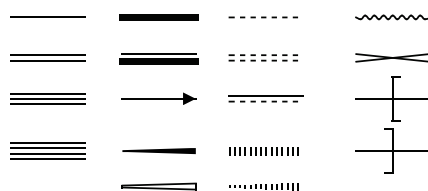
La barre d'outils des macromolécules affiche quelques unes des liaisons simples disponibles dans ScienceWord. Pour accéder aux autres liaisons, insérer l'une quelconque des liaisons simples de cette barre d'outils des macromolécules, par exemple la liaison  , puis

pendant qu'elle apparaît de la manière suivante sélectionnée



, accédez par le

menu contextuel à la boîte de dialogue "Propriétés de l'objet" où vous avez la possibilité de choisir l'une des dix-huit liaisons simples ci-dessous




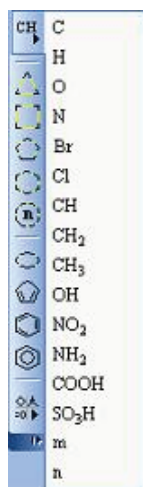
b) Combinaison des liaisons chimiques simples

- Une liaison en forme de trait entre en combinaison avec une autre liaison par l'une de ses extrémités (une telle combinaison est obtenue en cliquant pendant qu'une croix rouge apparaît) .
- Une liaison polygonale entre en combinaison avec une autre liaison soit par un sommet (une croix rouge apparaît lors de la combinaison) , soit par un côté (un trait jaune apparaît lors de la combinaison) .

c) Insertion d'un symbole chimique

Dessinez une liaison chimique comme ci- contre ——— .

Cliquez sur le bouton  dans la barre d'outils des macromolécules située à côté de la règle verticale. Le menu des symboles chimiques ci- dessous s'ouvre:



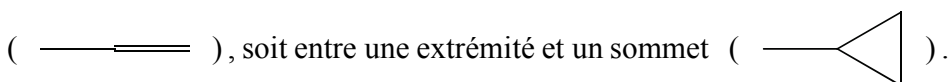
Cliquez sur " CH₃", puis approchez le pointeur de l'extrémité de la liaison chimique:



Cliquez dès qu'une croix rouge apparaît (voir illustration ci-dessus).


Pendant qu'une grille rectangulaire entoure le symbole CH₃ , vous pouvez le déplacer en utilisant l'une quelconque des quatre touches de direction (→, ←, ↑, ↓) ou bien avec la souris. Cette méthode permet aussi de modifier la longueur ou la direction de la liaison chimique.

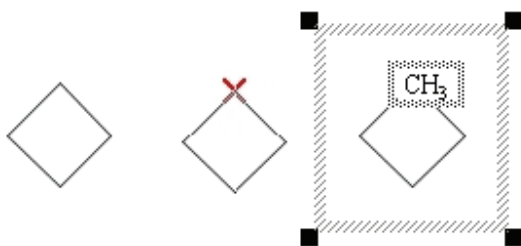
La même technique de liaison entre symbole chimique et liaison chimique reste applicable à la combinaison de deux liaisons chimiques. Cette combinaison se fait soit entre deux extrémités



d) Processus de combinaison entre un symbole chimique et une liaison polygonale



Le processus de combinaison ci- dessous s'explique de la façon suivante:

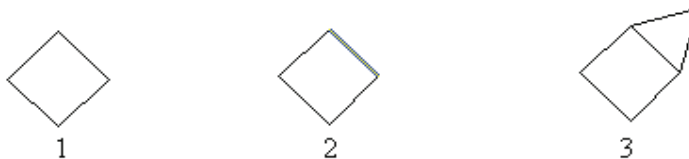
- On clique sur le cyclobutane "" dans la barre d'outils des macromolécules, puis on clique sur la page de travail pour obtenir (1).
- On clique sur le symbole chimique CH₃ dans le menu indiqué au c) , puis on approche le pointeur de l'un des sommets du cyclobutane. Une croix rouge apparaît comme l'indique (2), pour signifier que la combinaison peut avoir lieu.
- On clique à l'endroit où la croix rouge apparaît, pour obtenir (3).



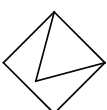
e) Processus de combinaison de deux liaisons polygonales

Le processus de combinaison ci-dessous s'explique de la façon suivante :

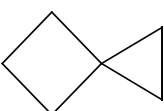
- On clique sur le cyclobutane "", puis on clique sur la page de travail pour obtenir (1).
- On clique sur le cyclopropane "", puis on approche le pointeur de l'un des côtés du cyclobutane. Un trait jaune apparaît comme l'indique (2), pour signifier que la combinaison peut avoir lieu.
- On clique à l'endroit où le trait jaune apparaît, pour obtenir (3).



Attention: Vous pouvez changer le sens de l'insertion du cyclopropane (triangulaire) au (3) en maintenant la touche "Ctrl" enfoncée pendant que vous cliquez sur le côté du

cyclobutane (carré). Vous obtenez le résultat ci-contre .

La combinaison a lieu sur un côté du cyclobutane. Elle peut aussi avoir lieu à un sommet,

comme le montre l'illustration ci-contre  et dans ce cas, c'est une croix rouge

qui indique que la combinaison peut avoir lieu. Pendant ce type d'insertion, vous pouvez aussi maintenir le bouton gauche de la souris appuyé et imposer une position à la liaison chimique.

Remarque 1

Un symbole chimique peut être inséré à un point de combinaison de deux liaisons chimiques



Remarque 2

Une liaison chimique peut entrer en combinaison avec une autre liaison chimique en un point comportant un élément chimique



Il est possible d'arranger autrement le symbole " $\frac{H_2}{C}$ ", via ses propriétés (voir modification des formules chimiques au 4) de ce chapitre). Par exemple, on peut obtenir l'arrangement CH_2 en appliquant l'option "Arrange droite" via "Propriétés des symboles chimiques", dans la boîte de dialogue "Propriétés de l'objet " de ce symbole.

f) Processus général de combinaison de deux objets chimiques

Nous désignons par objets chimiques les symboles chimiques, les liaisons chimiques, les macromolécules et plus généralement toutes sortes de formules chimiques.


i) On utilise la même technique qui consiste à combiner deux liaisons chimiques. La combinaison a donc lieu en une extrémité, sur le côté ou en un sommet d'une liaison chimique. Il résulte d'une telle combinaison un arrangement automatique par défaut de ces objets chimiques.

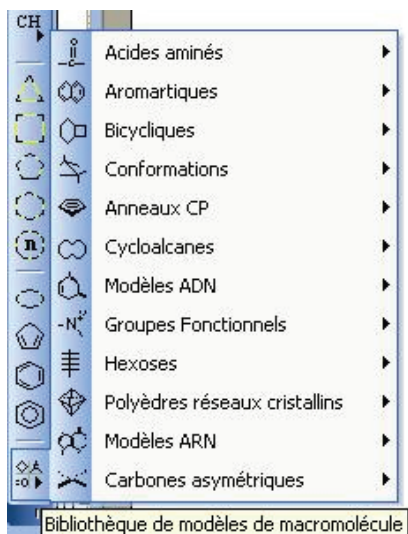
ii) - On sélectionne les deux objets chimiques.

- On applique l'utilitaire "Combiner  " à ces deux objets chimiques.

- On utilise l'utilitaire de la rotation et les touches de direction pour repositionner et déplacer ces objets en vue d'effectuer la jonction au niveau de leurs liaisons. Une croix rouge apparaît pendant que la jonction se réalise.

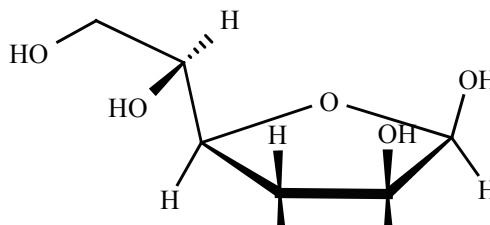
3) La gamme des formules organiques

Pour accéder aux formules organiques, il faut cliquer sur l'icône () dans la barre d'outils des Macromolécules située à côté de la règle verticale.



Cliquez sur la macromolécule désirée; alors que le pointeur prend la forme d'une croix (+), cliquez sur la page de travail.

Par exemple, la macromolécule ci-dessous est un sucre.



4) Modification des formules chimiques


a) Méthode générale

Il se peut que vous décidiez de modifier des éléments d'une formule chimique (le sucre ci-dessus par exemple).

- Si vous décidez de modifier l'épaisseur ou la couleur d'une liaison chimique *simple* ou d'arranger autrement un symbole chimique, il suffit de sélectionner cette liaison ou le symbole (cliquez une fois sur la liaison ou sur le symbole) . Ensuite appuyez le bouton droit de la souris, puis dans le menu contextuel qui s'ouvre, cliquez sur "**Propriétés**". A partir de la boîte de dialogue "Propriétés de l'objet", vous pouvez faire les modifications utiles. Confirmez ces modifications en cliquant sur "OK".

- Pour modifier la longueur ou la direction d'une liaison chimique, sélectionnez un bout de

cette liaison (ce bout est une extrémité dans le cas d'une liaison simple ou un sommet s'il s'agit d'une liaison polygonale). Il vous suffit donc de cliquer sur ce bout (s'il ne porte aucun symbole) ou bien sur le symbole qui s'y trouve (lorsqu'il y en a) . Vous pouvez ensuite procéder aux ajustements souhaités à l'aide des touches de direction (\rightarrow , \leftarrow , \uparrow , \downarrow) ou de la souris.

- Si vous désirez plutôt modifier le symbole chimique, par exemple si au lieu de OH vous souhaiteriez écrire OH⁻, alors double- cliquez sur OH. Dans la barre d'outils des macromolécules, trois utilitaires apparaissent comme le montre l'image ci- contre 

(de la droite vers la gauche, le premier est activé pour une écriture régulière, le second pour l'exposant et le troisième pour l'indice) . Il suffit de cliquer une fois sur le bouton approprié (dans le cas présent, il s'agit du deuxième bouton pour l'exposant) afin de l' activer, puis tapez la touche du clavier "-".

- Si vous souhaitez plutôt faire une modification globale sur l'ensemble des éléments de la formule, alors il vous revient de sélectionner toute la formule. Il y a deux procédés pour ce type de sélection:

(i) Double - cliquez sur une liaison chimique quelconque .

(ii) Cliquez sur un élément quelconque de la formule chimique (liaison chimique ou symbole chimique) . Le grand cadre de la zone commune de sélection apparaît. Appuyez la touche "Ctrl", puis cliquez sur ce cadre.

Dans chacun des cas (i) et (ii) , vous pouvez opérer toutes les modifications via les propriétés de la formule chimique. On accède aux propriétés par le menu contextuel de la même manière en appuyant le bouton droit de la souris.

b) Règles générales relatives à l'écriture et à la sélection des formules chimiques

- *Les formules chimiques sont intégrées comme des dessins. Les règles de la sélection en*


mode dessin et celles du fonctionnement du mode continu sont applicables aux formules chimiques.

- Vous pouvez aussi, comme c'est le cas des dessins, étirer la zone de sélection d'une macromolécule dans le but de réduire ou d'agrandir sa taille. Si la touche "Ctrl" est appuyée pendant cet étirement, alors les liaisons chimiques gardent une même proportion de rétrécissement ou d'agrandissement.


- Les formules chimiques sont aussi **insérées dans le texte** de la même manière que tout autre dessin.

c) Autres types de modification d'une formule chimique (non insérée dans le texte)

Les techniques particulières décrites ici sont applicables uniquement aux formules chimiques non insérées dans le texte.

- Dans une formule chimique, le remplacement d'un symbole chimique par un symbole du menu "Symboles chimiques  " se fait directement. Par exemple, pour remplacer H₃C par

H₂N dans la formule ci-contre $\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\overset{\text{O}}{\parallel}-\text{OH}$, il suffit de cliquer dans le menu

"Symboles chimiques  " sur "NH₂", puis de positionner le pointeur (qui prend la forme +) au niveau de H₃C, dans la formule; cliquez ensuite dès que la couleur bleue apparaît.

Vous obtenez alors le résultat $\text{H}_2\text{N}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\overset{\text{O}}{\parallel}-\text{OH}$.

- Vous pouvez aussi remplacer une liaison simple par une autre liaison simple ou une liaison polygonale. Dans ce cas, cliquez sur la nouvelle liaison qui remplace, puis approchez le pointeur de l'une des extrémités de la liaison simple à remplacer. Dès qu'une croix rouge

apparaît, maintenez le bouton gauche de la souris enfoncé et glissez le pointeur jusqu'à la deuxième extrémité de la liaison simple à remplacer. Lâchez ensuite le pointeur (une croix rouge apparaît au niveau de cette seconde extrémité dans le cas du remplacement par une liaison simple).

Par la même logique du remplacement d'une liaison simple par une autre liaison simple, vous pouvez joindre deux symboles chimiques quelconques par une liaison chimique simple.

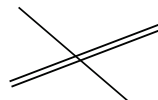
- Vous pouvez aussi supprimer un symbole chimique, une liaison chimique ou un groupe de symboles et de liaisons chimiques, après les avoir sélectionnés.


5) L'effet 3D

L'effet "3 D" de la propriété des liaisons chimiques est visible dans le cas du croisement des liaisons chimiques simples. Ce genre d'effet permet de voiler une partie d'une ou plusieurs liaisons chimiques qui figurent en arrière plan (voir illustration suivante).

Exemple:

Représentez les liaisons telle qu'elles apparaissent ci-contre



Groupez-les avec l'utilitaire "combiner ".

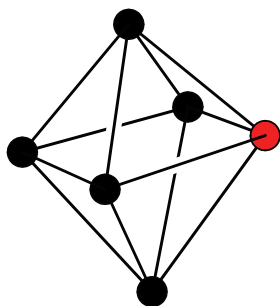
Sélectionnez l'une quelconque des liaisons puis accédez aux propriétés de l'objet. Cliquez sur "Optional future " puis cochez la case "3D Effect".

Vous obtenez le résultat ci-contre



(L'ordre de réalisation des liaisons importe

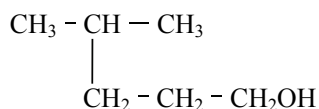
beaucoup. Ici, la deuxième liaison dessinée est la double liaison chimique).





Vous pouvez retrouver ce polyèdre dans la barre des macromolécules, dans le sous-menu "Polyèdres". Ici, le rayon des points (aux sommets) considérés dans les propriétés de l'objet, est 2mm. L'un des points est rempli de couleur rouge via les propriétés.

6) Quelques exemples d'écriture de formules chimiques

Exemple 1 : Ecrire la formule chimique ci-dessous:

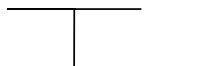



Etapes à suivre

i) Entrez en mode continu (cliquez sur le bouton  dans la barre de dessin) puis dans la barre des macromolécules, cliquez sur la liaison simple .

ii) Utilisez la méthode de combinaison des liaisons chimiques pour représenter les cinq liaisons de la formule chimique comme ci-dessous (assurez-vous que les traits sont liés,

l'apparition de la croix rouge s'avère donc nécessaire)



iii) Ensuite, sans quitter le mode continu, cliquez dans la barre des macromolécules sur le bouton , puis dans la liste des symboles qui s'ouvre, cliquez sur "CH₃". Pendant que le pointeur prend la forme d'une croix sur la feuille de travail, insérez le symbole "CH₃" en cliquant continuellement aux endroits convenables (une croix rouge apparaît juste avant chaque insertion).

Vous obtenez le résultat suivant

$$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \text{ --- } \text{CH} \text{ --- } \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H}_2\text{C} \text{ --- } \text{C} \text{ --- } \end{array}$$

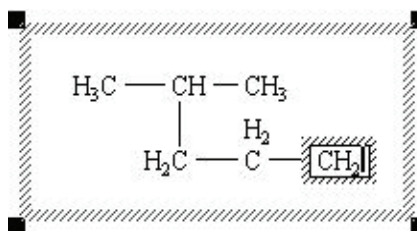
iv) Suivez la même méthode d'insertion pour insérer les symboles "CH₂" et "CH".


Le résultat est le suivant:

$$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \text{ --- } \text{CH} \text{ --- } \text{CH}_3 \\ | \quad \quad \text{H}_2 \\ \text{H}_2\text{C} \text{ --- } \text{C} \text{ --- } \end{array}$$

v) Pour écrire "CH₂OH", insérez d'abord "CH₂", désactivez le mode continu, puis double-cliquez sur le symbole "CH₂".

Vous obtenez alors le résultat ci- contre:



vi) Constatez que le curseur clignote dans la zone de texte de "CH₂" et que les utilitaires nécessaires se sont affichés dans la barre de dessin. Assurez- vous alors que l'utilitaire "Ecriture normale  " est actif puis tapez "OH".

Vous obtenez alors le résultat suivant :

$$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \text{ --- } \text{CH} \text{ --- } \text{CH}_3 \\ | \quad \quad \text{H}_2 \\ \text{H}_2\text{C} \text{ --- } \text{C} \text{ --- } \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$$

vii) Pour arranger autrement les symboles de la formule chimique, cliquez sur un symbole quelconque ou une liaison quelconque de cette formule. Ensuite, maintenez enfoncée la touche "Ctrl" puis cliquez sur la grille rectangulaire qui encadre toute la formule. Accédez aux propriétés de la formule, cliquez sur "**Propriétés des symboles chimiques**", puis cochez l'option "**Arrange à droite**". Confirmez enfin en cliquant sur "**OK**".

Vous obtenez donc:

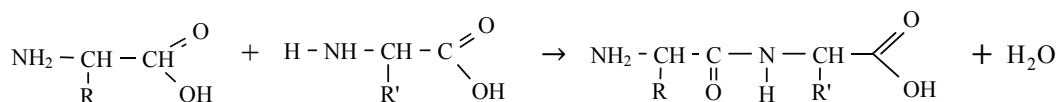
$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$$


viii) Insérez maintenant cette formule dans le texte. Sélectionnez -la ensuite, puis dans le menu contextuel, cliquez sur "**Format de l'objet**". Dans la fenêtre "*A partir de la base inférieure*" entrez le nombre 13, puis cliquez sur "**OK**" pour confirmer.

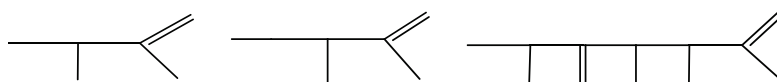
Vous obtenez enfin le résultat désiré:


$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$$

Exemple 2 : Ecrivez la formule chimique ci-dessous:



i) Activez le mode continu  puis réalisez les liaisons de chacune des trois formules chimiques comme ci-dessous:



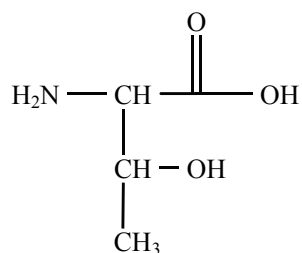
ii) Sans quitter le mode continu, insérez les éléments. Notez que vous ne pouvez pas insérer directement des symboles tels que R et R'. Cependant, vous pouvez d'abord insérer à leur place un quelconque élément du menu "Symboles chimiques ", H par exemple.

Utilisez ensuite les procédés décrits au iii) et au iv) de *l'exemple 1* pour avoir le résultat suivant:

lorsque la combinaison a lieu en une extrémité).

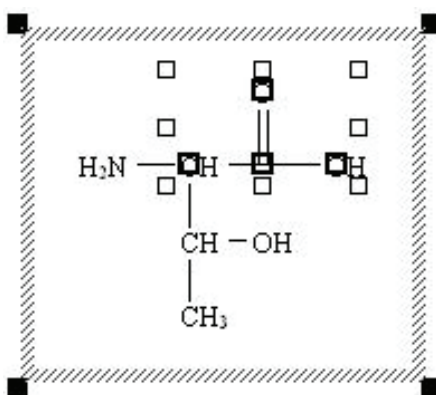
8) Rotation d'une partie d'un objet chimique (non inséré dans le texte)


Considérons par exemple l'objet chimique ci-dessous

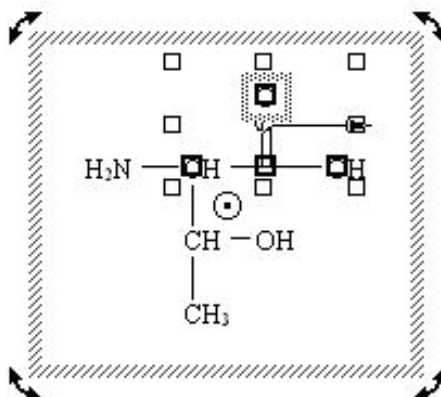


Nous pouvons par exemple décider de sélectionner la portion ci-contre $\text{CH} - \overset{\text{O}}{\parallel} - \text{OH}$.

Le principe de sélection étant le même que dans le cas des dessins, on peut utiliser les touches "Ctrl" et "Shift". Mais on peut choisir de le faire d'un coup en activant le mode dessin, puis on fait glisser la souris de façon à dessiner un rectangle qui englobe la portion voulue. Dans tous les cas, on observe le résultat suivant



Dans la barre des dessins, cliquez sur l'icône "  ". Alors l'objet chimique apparaît comme suit:




L'extrémité gauche de la flèche ci-contre $\circ \longrightarrow$ est le centre de rotation de la portion sélectionnée. Pour effectuer la rotation de cette portion, il suffit de saisir l'extrémité droite de cette flèche (pendant que le pointeur prend la forme ci-contre \curvearrowright), puis de faire glisser la souris de façon appropriée. On peut à l'aide de la souris, déplacer la position de ce centre de rotation.

Le point encerclé ci-contre \odot est le centre de rotation de l'objet chimique tout entier. Pour effectuer la rotation de l'objet chimique, saisissez l'un quelconque des arcs fléchés \nwarrow en un coin de la zone de sélection de l'objet, puis faites glisser la souris de façon appropriée. Dans ce cas aussi, on peut à l'aide de la souris, déplacer la position de ce centre de rotation.

Remarque 1:

Lorsque tout l'objet chimique est entièrement sélectionné, les centres de rotation sont confondus. La position de l'un ou l'autre peut être modifiée à l'aide de la souris. Les deux types de rotation ci-dessus coexistent.

Remarque 2:

Le même principe de rotation s'applique aux objets chimiques appartenant à une même zone de sélection, donc aux objets chimiques groupés avec la fonction "Combiner" 

CONTENTS

1) Généralités.....	2
2) Insertion des liaisons chimiques simples et des symboles chimiques.....	3
a) Insertion des liaisons chimiques simples.....	4
i) Suivant une direction régulière.....	4
ii) Suivant une direction contrôlée.....	4
b) Combinaison des liaisons chimiques simples.....	5
c) Insertion d'un symbole chimique.....	5
d) Processus de combinaison entre un symbole chimique et une liaison polygonale..	6
e) Processus de combinaison de deux liaisons polygonales.....	7
f) Processus général de combinaison de deux objets chimiques.....	8
3) La gamme des formules organiques.....	8
4) Modification des formules chimiques.....	9
a) Méthode générale.....	9
b) Règles générales relatives à l'écriture et à la sélection des formules chimiques...	10
c) Autres types de modification d'une formule chimique non insérée dans le texte..	11
5) L'effet 3D.....	12
6) Quelques exemples d'écriture de formules chimiques.....	13
7) Les objets chimiques et l'utilitaire "Combiner ".....	16
8) Rotation d'une partie d'un objet chimique (non inséré dans le texte).....	17