

L^AT_EX et chimie

Georges Khaznadar <georgesk@ofset.org>

association OFSET

Juin 2011



Table des matières

- 1 Le paquet chemfig : constructions locales
 - Utiliser chemfig
 - De simples liaisons
 - Les angles absolus
 - Les angles relatifs
- 2 Le paquet chemfig : constructions non locales
 - Les cycles
 - Les cycles aromatiques
- 3 Réactions chimiques
 - Cycles imbriqués
 - Réactifs nommés, bilan de réaction
 - Décoration de la flèche de réaction
- 4 Dessiner des molécules et les exporter vers L^AT_EX
 - Chemtool
 - Exportation Chemtool → L^AT_EX
 - Trucs et astuces
 - Pour, contre les paquets L^AT_EX spécialisés



À propos de l'auteur

Georges Khaznadar est membre d'OFSET <www.ofset.org>, association internationale pour la promotion du logiciel libre dans l'enseignement et la formation, et de l'association WIMSÉDU <www.wimsedu.info>



Utiliser chemfig

Il faut tout d'abord récupérer le paquet chemfig dans le dépôt [CTAN](#).

Le strict minimum est de récupérer les fichiers chemfig.sty et chemfig.tex. Les autres fichiers sont de la documentation, qui existe en français.

On peut par exemple placer une copie des fichiers dans le répertoire courant, et mettre `\usepackage{chemfig}` dans l'en-tête du document.

Remarque : avec chemfig, le chimiste ne dessine pas, il doit exprimer la molécule désirée en utilisant une syntaxe précise.



chemfig : de simples liaisons

code	Résultat	codes pour des angles	Résultat
<code>\chemfig{C-H}</code>	C — H	<code>\chemfig{C-[0]H}</code>	C — H
<code>\chemfig{C=H}</code>	C = H	<code>\chemfig{C=[1]H}</code>	C = H
<code>\chemfig{C~H}</code>	C ≡ H	<code>\chemfig{C~[2]H}</code>	C ≡ H
<code>\chemfig{C>H}</code>	C ► H	<code>\chemfig{C>[3]H}</code>	C ► H
<code>\chemfig{C<H}</code>	C ◄ H	<code>\chemfig{C<[4]H}</code>	H ◄ C
<code>\chemfig{C>:H}</code>	C ◌ H	<code>\chemfig{C>:[5]H}</code>	C ◌ H
<code>\chemfig{C<:H}</code>	C ◌ H	<code>\chemfig{C<:[6]H}</code>	H ◌ C
<code>\chemfig{C> H}</code>	C ▷ H	<code>\chemfig{C> [7]H}</code>	C ▷ H
<code>\chemfig{C< H}</code>	C ◁ H	<code>\chemfig{C< [8]H}</code>	C ◁ H

On remarque que les chiffres 0 et 8 pour l'angle donnent le même résultat.

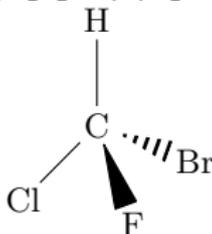


Les angles absolus

la notation `[chiffre]` dénote un angle multiple de $\pi/4$ ou 45° . Il s'agit d'un angle absolu, avec l'origine et le sens de rotation conformes à l'usage en trigonométrie.

Pour des angles arbitraires dans l'intervalle $[0, 2\pi]$ ou $[0, 360^\circ]$, la notation est `[:chiffre]`, l'unité utilisée étant le degré. À titre d'exemple, voici une molécule chirale *CHFCIBr* :

```
\chemfig{C(-[2]H)(-[5]Cl)(<[: -70]F)(<[: -20]Br)}
```



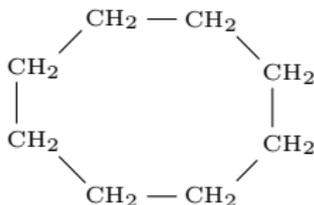
Remarquez les parenthèses. Celles-ci permettent que le dernier atome écrit ne soit pas pris comme origine pour la liaison suivante.



Les angles relatifs

La syntaxe des angles relatifs est `[::chiffre]`, l'angle est relatif à la direction de la dernière liaison tracée :

```
\chemfig{CH_2-CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-[::45]CH_2-\mbox{   }}}
```



Remarque : la boîte vide `\mbox{ }` sert à raccourcir la dernière liaison afin d'éviter que celle-ci empiète sur le premier carbone.



Les cycles

Molécule

symboliquement ...

pentadiène (formule topologique)

pyrrole (formule topologique)

imidazole (formule topologique)

N-méthylpyrrole (f. topologique)

Code

```
\chemfig{A*5(-B=C-D-E=)}
```

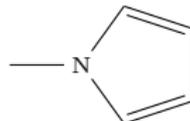
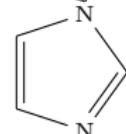
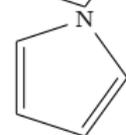
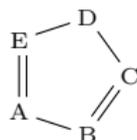
```
\chemfig{*5(-----)}
```

```
\chemfig{*5(--N-=)}
```

```
\chemfig{*5(-N=-N-=)}
```

```
\chemfig{-N*5(-----)}
```

Résultat



Les cycles aromatiques

Molécule

symboliquement ...

pentadiène (formule topologique)

pyrolle (formule topologique)

imidazole (formule topologique)

N-méthylpyrolle (f. topologique)

Code

```
\chemfig{A**5(-B-C-D-E-)}
```

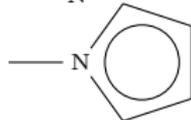
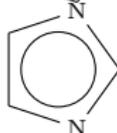
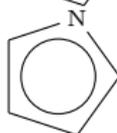
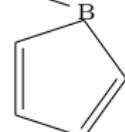
```
\chemfig{*5(--===)}
```

```
\chemfig{**5(---N--)}
```

```
\chemfig{**5(-N--N--)}
```

```
\chemfig{-N**5(-----)}
```

Résultat



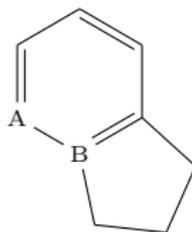
Cycles imbriqués

Molécule **Code**

exemple

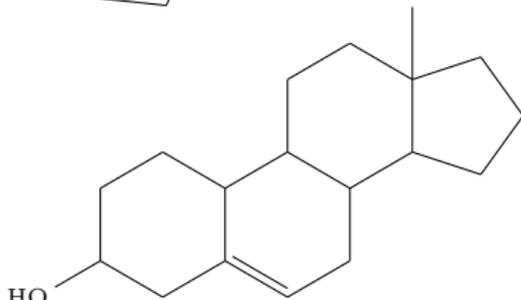
```
\chemfig{A*6(-B*5(-----)=---=)}
```

Résultat



stéroïde

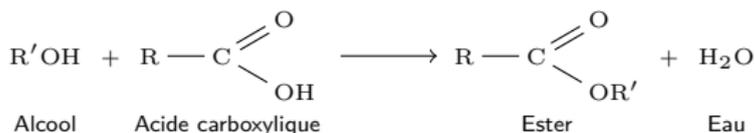
```
\chemfig{[:30]HO-*6(--*6(=--  
*6(-*5(-----)-(-[:+0])---)--  
)-----)}
```



Réactifs nommés, bilan de réaction

chemfig possède tous les mécanismes nécessaires pour représenter des équations de réaction. Ci-dessous, un exemple simple. Remarquez le `\chemnameinit{...}` au début pour assurer que les noms seront placés suffisamment bas.

```
\chemnameinit{\chemfig{R-C(-[: -30]OH)=[:30]O}}  
\chemname{\chemfig{R'OH}}{Alcool}  
\chemsign{+}  
\chemname{\chemfig{R-C(-[: -30]OH)=[:30]O}}{Acide carboxylique}  
\chemrel{->}  
\chemname{\chemfig{R-C(-[: -30]OR')=[:30]O}}{Ester}  
\chemsign{+}  
\chemname{\chemfig{H_2O}}{Eau}  
\chemnameinit{}
```



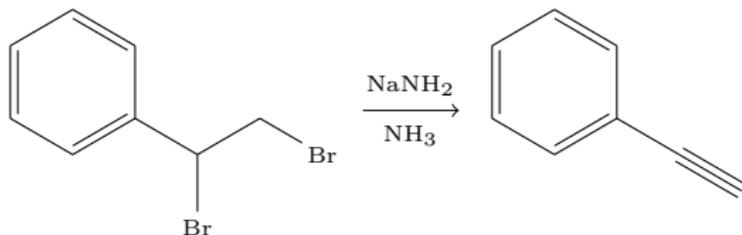
Décoration de la flèche de réaction

Il existe plusieurs flèches de réactions :

Code	Flèche
<code>A\chemrel{->}B</code>	A \longrightarrow B
<code>A\chemrel{<-}B</code>	A \longleftarrow B
<code>A\chemrel{<->}B</code>	A \longleftrightarrow B
<code>A\chemrel{<>}B</code>	A \rightleftharpoons B

On peut placer des annotations sous et sur la flèche :

```
\chemfig{*6(==*6(-(-Br)-(-Br))-==*)}  
\chemrel[\chemfig{NaNH_2}][\chemfig{NH_3}]{->}  
\chemfig{*6(==(-^-)-==*)}
```



Chemtool

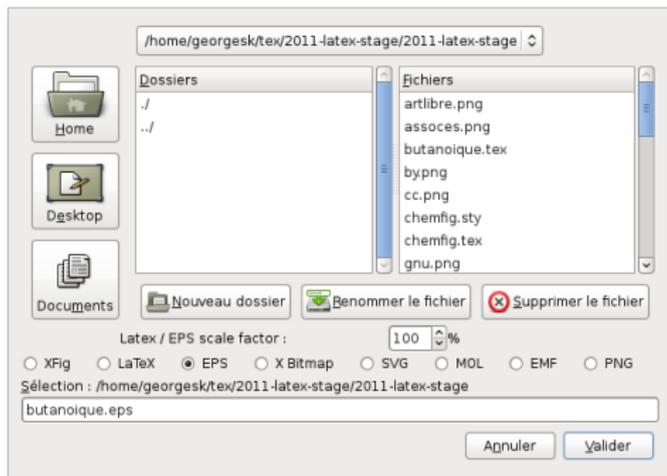
Les molécules se tracent rapidement à la souris à l'aide de `chemtool`, en formule topologique, après quoi on décore les squelettes à l'aide de symboles atomiques ou autres.

The screenshot shows the Chemtool application window. At the top, there is a menu bar with 'File', 'Edit', 'View', 'Tools', and 'Help'. Below the menu is a toolbar with various icons for drawing rings, lines, and editing. A 'Text' input field contains the text 'Acide butanoïque' and a zoom level of '14'. The main drawing area displays a skeletal structure of butanoic acid (CH₃(CH₂)₂COOH) with the label 'Acide butanoïque' centered below it.



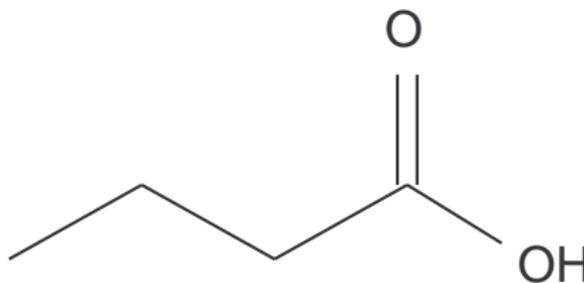
Exportation Chemtool → L^AT_EX

On utilise la commande **Fichier** → **Exporter ...** disponible au menu de l'application :



Exportation Chemtool → L^AT_EX

Parmi les formats d'exportation, PNG, LaTeX et EPS peuvent être utilisés. Le premier s'inclut à l'aide de `\includegraphics[width=...]{butanoïque}`; le deuxième nécessite le paquet `pictex` et peut être retravaillé (ça exporte 85 lignes pour l'exemple choisi), le troisième peut être inclus comme image vectorielle à l'aide de `\includegraphics[width=...]{butanoïque}`, éventuellement après une conversion vers le format PDF si on utilise PDFL^AT_EX.



Acide butanoïque



Trucs et astuces

Dans tous les cas, ajouter de la chimie dans un document L^AT_EX requiert un peu de peine, mais le résultat typographique est à la hauteur de l'investissement. Quand j'utilise Chemtool régulièrement, je ne manque pas d'automatiser la compilation à l'aide d'un fichier Makefile qui permet de mettre à jour les fichiers PDF à partir des fichiers EPS que je génère à l'aide de chemtool. D'autre part, j'enregistre systématiquement les sources des constructions moléculaires au format CHT, pour pouvoir revenir dessus à l'aide de Chemtool. Dans le fichier Makefile, les lignes suivantes automatisent les conversions :

```
CHTFILES = $(shell ls *.cht)
CHTFILES_CONVERTED = $(patsubst %.cht, %.pdf, $(CHTFILES))

all: $(CHTFILES_CONVERTED) # force la mise à jour des fichiers PDF

%.pdf: %.eps
    pstopdf $< $@
```



Pour, contre les paquets L^AT_EX spécialisés

Pour	Contre
Le rendu par un paquet tel que chemfig est impeccable, et l'édition de molécules va plus vite qu'avec la simple extension graphique tikz.	Quand le molécule devient complexe, bien malin qui sait trouver à quel endroit de la syntaxe on doit intervenir pour apporter une modification minime. Exemple : aller à la formule du stéroïde (1), et métyler la position 15 😊.
Avec un paquet spécialisé, un environnement de compilation pour L ^A T _E X tel que TeXmaker ou Kile offre tout ce qui est nécessaire pour enchaîner les opérations de compilation et de visualisation.	

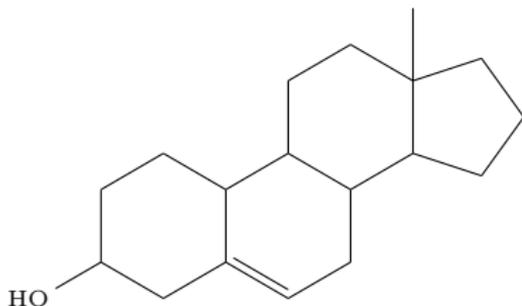


chemfig contre chemtool

Chemfig

Bien réfléchir à l'imbrication des cycles et à la position précise des ramifications. Invoquer la macro `\chemfig` sans faute.

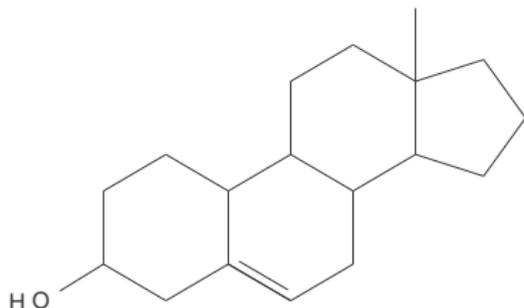
```
\chemfig{[:30]HO-*6(--*6(==  
*6(-*5(----)-(-[:+0])----)-- )----)}
```



Chemtool

Utiliser le template « steroid », puis ajouter les ramifications à la souris. Enregistrer au format CHT puis EPS. Invoquer le convertisseur `pstopdf`.

```
\includegraphics[width=0.4\textwidth]{steroid}
```



Crédits

Les explications au sujet de Chemfig sont inspirées du document de l'auteur original : [chemfig_doc_fr.pdf](http://chemfig.doc.fr.pdf).

Toutes les illustration sont © 2011 Georges Khaznadar, licence : [Creative Commons Attribution ShareAlike](http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) 

Ce diaporama est disponible sous licence : [GFDL](http://www.gnu.org/licenses/gfdl.html)  , à l'adresse <http://speeches.ofset.org/georges> (choisir l'item **2011-latex-stage**).

