

ACD/ChemSketch

Version 10.0 pour
Microsoft Windows

Manuel de Référence

Description complète de l'interface

Advanced Chemistry Development, Inc.

Copyright © 1997-2006 Advanced Chemistry Development, Inc. Tous droits réservés.

ACD/Labs est une marque déposée de Advanced Chemistry Development, Inc.

Microsoft et Windows sont des marques déposées de Microsoft Corporation aux Etats-Unis et/ou dans d'autres pays Copyright © 2006 Microsoft Corporation. Tous droits réservés.

IBM est une marque déposée d'International Business Machines Corporation Copyright © IBM Corporation 1994, 2006. Tous droits réservés.

Adobe, Acrobat, PDF, Formats Documents Portables, et les structures et opérateurs de données associés sont soit des marques déposées soit des marques d'Adobe Systems Incorporated aux Etats-Unis et/ou dans d'autres pays Copyright © 2006 Adobe Systems Incorporated. Tous droits réservés.

Camtasia est une marque déposée de TechSmith Corporation, et Camtasia Studio est une marque déposée de TechSmith Corporation Copyright © 1999-2006 TechSmith Corporation. Tous droits réservés.

Toutes les autres marques déposées mentionnées dans ce manuel de référence sont la propriété de leurs propriétaires respectifs.

Toutes les marques déposées sont reconnues.

Les informations contenues dans ce document sont susceptibles d'être modifiées sans avertissement et sont fournies « en l'état » sans garantie. Advanced Chemistry Development, Inc. n'apporte aucune garantie d'aucune sorte concernant ce manuel ainsi que, entre autres, les garanties impliquées de commercialisation et d'adéquation avec un but particulier. Advanced Chemistry development, Inc. ne pourra être tenu responsable des erreurs contenues dans ce manuel, ni des dégâts directs, indirects, spéciaux, fortuits ou consécutifs à l'utilisation de ce matériel.

Table des Matières

Avant de commencer.....	viii
A propos de ce manuel de référence.....	viii
Conventions de souris.....	viii
Pour plus d'informations.....	viii
<i>Comment nous contacter.....</i>	<i>ix</i>
<i>Mises à jour en ligne.....</i>	<i>ix</i>
1. Introduction.....	1
1.1 A propos d'ACD/ChemSketch.....	1
1.2 Modules supplémentaires.....	1
1.3 Nouveautés dans la version 10.0.....	2
1.4 Version gratuite.....	3
2. Vue d'ensemble de l'interface.....	3
2.1 Objectifs.....	3
2.2 Eléments d'interface communs.....	3
2.2.1 <i>Personnalisation de la barre d'outils.....</i>	<i>4</i>
2.3 Barre de titre.....	4
2.4 Palette de couleurs.....	5
2.5 Barre RSS News – Nouveauté 10.0 !.....	5
2.5.1 <i>Boîte de dialogue Canaux RSS.....</i>	<i>5</i>
2.5.2 <i>Boîte de dialogue Paramètres de Proxy HTTP.....</i>	<i>6</i>
2.6 Barre d'état.....	7
2.7 Modes Structure et Dessin.....	8
3. Mode Structure.....	9
3.1 Objectifs.....	9
3.2 Informations générales.....	9
3.3 Ecran.....	9
3.4 Barre Menu.....	11
3.5 Barre d'outils générale.....	11
3.5.1 <i>Bouton Supprimer.....</i>	<i>13</i>
3.5.2 <i>Bouton Zoom avant.....</i>	<i>15</i>
3.5.3 <i>Bouton Zoom arrière.....</i>	<i>15</i>
3.5.4 <i>Case Zoom et boutons de dimensionnement d'image.....</i>	<i>15</i>
3.5.5 <i>Bouton Visualisation 3D.....</i>	<i>16</i>
3.6 Barre d'outils Structure.....	16
3.6.1 <i>Bouton Sélectionner/Déplacer.....</i>	<i>17</i>
3.6.2 <i>Bouton Sélectionner/Pivoter/Redimensionner.....</i>	<i>19</i>
3.6.3 <i>Bouton Rotation 3D.....</i>	<i>20</i>
3.6.4 <i>Bouton Activer/Désactiver lasso.....</i>	<i>20</i>
3.6.5 <i>Bouton Dessin normal.....</i>	<i>21</i>
3.6.6 <i>Bouton Dessin continu.....</i>	<i>21</i>
3.6.7 <i>Bouton Dessin de chaînes.....</i>	<i>22</i>
3.6.8 <i>Bouton Liaisons stéréo avant.....</i>	<i>23</i>

3.6.9	Bouton Liaisons stéréo arrière.....	24
3.6.10	Bouton Liaisons de coordination.....	24
3.6.11	Boutons Liaisons spéciales.....	25
3.6.12	Boutons courbe de délocalisation pleine/en pointillés.....	26
3.6.13	Boutons Liaison de Markush.....	26
3.6.14	Bouton Plus de Réaction.....	28
3.6.15	Boutons Flèche de Réaction.....	28
3.6.16	Bouton Etiquetage de flèche de réaction.....	29
3.6.17	Bouton Calculateur de réaction.....	30
3.6.18	Bouton Mapped Atome-Atome.....	31
3.6.19	Bouton Polymères.....	32
3.6.20	Bouton Changer la position.....	33
3.6.21	Bouton Placer la liaison horizontalement.....	34
3.6.22	Bouton Placer la liaison verticalement.....	34
3.6.23	Bouton Pivoter autour de la liaison.....	34
3.6.24	Bouton Renverser de haut en bas.....	34
3.6.25	Bouton Renverser de gauche à droite.....	34
3.6.26	Bouton Modèle instantané.....	35
3.6.27	Bouton Calculer paramètres du substituant.....	35
3.7	Barre d'outils Atomes.....	36
3.7.1	Boutons Atome d'interrogation.....	36
3.7.2	Boutons Liaison d'interrogation.....	37
3.7.3	Boutons Atome.....	37
3.7.4	Bouton Editer étiquette atome.....	38
3.7.5	Boutons Pseudo atome et Etiquette radical.....	39
3.7.6	Boutons Particules de charge/radicalaires.....	40
3.7.6.1	Boutons Charge d'incrément (+) et de décrétement (-).....	40
3.7.6.2	Boutons Particules radicalaires.....	40
3.7.7	Bouton Propriétés chimiques atomiques.....	40
3.7.8	Bouton numérotation manuelle.....	41
3.8	Barre d'outils Référence.....	42
3.9	Menu Fichier.....	43
3.9.1	Nouveau.....	43
3.9.2	Ouvrir.....	43
3.9.3	Fermer.....	43
3.9.4	Enregistrer.....	44
3.9.5	Enregistrer sous.....	44
3.9.6	Enregistrer tout.....	44
3.9.7	Exporter.....	44
3.9.7.1	Boîte de dialogue Options d'Export TIFF.....	45
3.9.8	Importer.....	45
3.9.9	Lancer ChemBasic.....	46
3.9.10	Gestionnaire de formulaires.....	46
3.9.11	Mise en page.....	46
3.9.11.1	Boîte de dialogue Mise en page: onglet taille & orientation.....	46
3.9.11.2	Boîte de dialogue Mise en page: onglet marges.....	47
3.9.11.3	Boîte de dialogue Mise en page: onglet poster.....	48
3.9.12	Imprimer.....	48
3.9.13	Aperçu avant impression.....	49
3.9.14	Configuration de l'imprimante.....	49
3.9.15	Propriétés.....	50
3.9.16	Envoyer > Tel quel / En tant que PDF.....	50
3.9.17	Associations de fichiers.....	51
3.9.18	Quitter.....	52
3.9.19	Historique.....	52
3.10	Menu Edition.....	52

3.10.1	Annuler.....	52
3.10.2	Rétablir.....	53
3.10.3	Couper.....	53
3.10.4	Copier.....	53
3.10.5	Coller > Par défaut.....	54
3.10.6	Coller > Remplacer.....	54
3.10.7	Coller > Spécial.....	54
3.10.8	Coller > Structure.....	55
3.10.9	Coller > Tableau.....	55
3.10.10	Supprimer.....	55
3.10.11	Sélectionner tout	55
3.10.12	Insérer un objet.....	56
3.10.13	Editer un objet.....	56
3.11	Menu Pages.....	56
3.11.1	Nouveau.....	56
3.11.2	Insérer	56
3.11.3	Changer l'ordre.....	57
3.11.4	Supprimer.....	57
3.11.5	Renommer.....	57
3.11.6	Colorer.....	57
3.11.7	En-tête et pied de page > Editer.....	57
3.11.8	En-tête et pied de page > Charger.....	59
3.11.9	En-tête et pied de page > Enregistrer.....	59
3.11.10	En-tête et pied de page > Enregistrer sous.....	59
3.11.11	En-tête et pied de page > Définir en tant que Par défaut.....	59
3.11.12	En-tête et pied de page > Effacer.....	59
3.11.13	En-tête et pied de page > Afficher.....	59
3.11.14	Précédent.....	59
3.11.15	Suivant.....	60
3.11.16	Premier.....	60
3.11.17	Dernier.....	60
3.12	Menu Outils.....	60
3.12.1	Propriétés des Structures.....	61
3.12.1.1	Panneau Propriétés: onglet Commun.....	62
3.12.1.2	Panneau Propriétés: onglet Atome.....	63
3.12.1.3	Panneau Propriétés: onglet Liaison.....	64
3.12.1.4	Panneau Propriétés: onglet Spécial.....	66
3.12.2	Uniformiser la structure.....	66
3.12.3	Vérifier les formes tautomères.....	66
3.12.3.1	Algorithme ACD/Tautomères.....	67
3.12.4	Optimisation des structures 3D.....	68
3.12.5	Calcul du point d'ébullition.....	69
3.12.6	Ciseaux MassSpec.....	69
3.12.7	Afficher l'aromaticité.....	70
3.12.8	Masquer l'aromaticité.....	70
3.12.9	Développer les formules abrégées	70
3.12.10	Ajouter des hydrogènes explicites.....	71
3.12.11	Supprimer des hydrogènes explicites.....	71
3.12.12	Amener liaison(s) vers l'avant.....	71
3.12.13	Envoyer liaison(s) vers l'arrière-plan.....	72
3.12.14	Renumérotation automatique.....	72
3.12.15	Supprimer numérotation.....	72
3.12.16	Générer > Nom de structure.....	73
3.12.17	Générer > Structure à partir d'un nom.....	73
3.12.17.1	Boîte de dialogue Options ACD/Nom de structure.....	75
3.12.18	Générer > Descripteurs stéréochimiques.....	76

3.12.19	Générer options de descripteurs stéréochimiques - Nouveauté 10.0 !.....	76
3.12.20	Générer > Notation SMILES.....	77
3.12.21	Générer > Structure à partir de SMILES.....	77
3.12.22	Générer > InChI de structure.....	78
3.12.23	Générer > Options InChI.....	78
3.12.24	Générer > Structure à partir de InChI.....	79
3.12.25	Rechercher une structure— Version commerciale uniquement!.....	79
3.12.25.1	Boîte de dialogue Rechercher dans les fichiers.....	82
3.12.25.2	Boîte de dialogue Options de recherche: onglet Général— Version commerciale uniquement!.....	83
3.12.25.3	Boîte de dialogue Options de recherche: onglet Ouvrir— Version commerciale uniquement!.....	84
3.12.25.4	Boîte de dialogue Options de recherche par affinité— Version commerciale uniquement!.....	85
3.12.26	Calculer > "Nom de Propriété" / Toutes les Propriétés.....	85
3.12.27	Calculer > Sélectionner des propriétés pour calculer.....	86
3.12.28	Calculer > Propriétés sélectionnées.....	87
3.13	Menu Modèle.....	88
3.13.1	Fenêtre Modèle.....	88
3.13.2	Organiseur de modèle.....	90
3.13.3	Enregistrer modèle Utilisateur.....	91
3.13.4	Tableau de radicaux.....	91
3.13.5	Table périodique.....	92
3.13.6	Dictionnaire—Version commerciale uniquement!.....	94
3.14	Menu Options.....	96
3.14.1	Préférences.....	96
3.14.1.1	Boîte de dialogue Préférences: onglet Général.....	96
3.14.1.2	Boîte de dialogue Préférences: onglet Structure.....	97
3.14.1.3	Boîte de dialogue Préférences: onglet Réaction.....	100
3.14.1.3	Boîte de dialogue Préférences: onglet Uniformiser – Nouveauté 10.0 !.....	101
3.14.2	Afficher quadrillage.....	102
3.14.3	Alignement quadrillage.....	102
3.14.4	Afficher la palette.....	102
3.14.5	Afficher RSS.....	102
3.14.6	Définir le style de dessin de Structure.....	102
3.14.7	Appliquer le style de dessin de Structure.....	103
3.14.8	Organiseur de compléments.....	103
3.14.9	Organiseur ChemBasic.....	104
3.14.9.1	Boîte de dialogue Programme ChemBasic.....	105
3.15	Menu Documents.....	106
3.15.1	Suivant.....	106
3.15.2	Précédent.....	106
3.15.3	Fermer tout.....	106
3.16	Menu Compléments.....	106
3.17	ACD/Labs en ligne (I-Lab).....	107
3.18	Menu ACD/Labs.....	107
3.18.1	Programme chargé suivant.....	108
3.18.2	Fermer tout.....	108
3.19	Menu Aide.....	108
3.19.1	Rubriques d'aide.....	108
3.19.2	Utilisation de l'aide.....	108
3.19.3	Astuce du jour.....	108
3.19.4	Instructions pour auteurs.....	108
3.19.5	Aide ChemBasic.....	108
3.19.6	Préférences de Boîte Message.....	109

3.19.7	<i>Documents</i>	110
3.19.8	<i>Aller sur le site Web ACD</i>	111
3.19.9	<i>Rapport d'erreur / Demande de caractéristiques</i>	111
3.19.10	<i>Configuration du rapport d'erreur</i>	111
3.19.11	<i>A propos d'ACD/ChemSketch</i>	111
4.	Mode Dessin	112
4.1	Objectifs.....	112
4.2	Informations générales.....	112
4.3	Ecran.....	112
4.4	Barre Menu.....	114
4.5	Barre d'outils générale.....	114
4.6	Barre d'outils Edition.....	114
4.6.1	<i>Bouton Sélectionner/Déplacer/Redimensionner</i>	115
4.6.2	<i>Bouton Sélectionner/Déplacer/Faire pivoter</i>	116
4.6.3	<i>Bouton Edition de Noeuds</i>	117
4.6.3.1	Barre d'outils Noeud.....	118
4.6.4	<i>Bouton Edition de Texte</i>	119
4.6.4.1	Barre d'outils Texte.....	119
4.7	Barre d'outils Dessin.....	120
4.7.1	<i>Bouton Trait</i>	121
4.7.2	<i>Boutons Arc</i>	122
4.7.3	<i>Bouton Courbe</i>	122
4.7.4	<i>Bouton Trait de forme variable</i>	123
4.7.5	<i>Bouton dessin de flèche</i>	123
4.7.6	<i>Bouton Rectangle</i>	124
4.7.7	<i>Bouton Rectangle Arrondi</i>	124
4.7.8	<i>Bouton Ellipse</i>	125
4.7.9	<i>Bouton Polygone</i>	125
4.7.10	<i>Bouton Insérer Bitmap</i>	126
4.7.11	<i>Bouton texte</i>	126
4.7.12	<i>Bouton Tableau</i>	126
4.7.12.1	Barre d'outils Tableau.....	127
4.7.13	<i>Boutons Crochets</i>	127
4.7.14	<i>Boutons Bulles</i>	128
4.7.15	<i>Bouton Modèle de Rapport</i>	129
4.8	Menu Fichier.....	129
4.9	Menu Edition.....	129
4.10	Menu Pages.....	129
4.11	Menu Outils.....	129
4.11.1	<i>Panneau Style du stylo</i>	130
4.11.2	<i>Panneau Style de remplissage</i>	130
4.11.3	<i>Panneau Style de flèche</i>	131
4.11.4	<i>Panneau Police</i>	132
4.11.5	<i>Panneau Paragraphe</i>	133
4.11.6	<i>Panneau Tableau</i>	134
4.11.7	<i>Panneau Actualisation du style de l'objet</i>	135
4.11.7.1	Panneau Objets : Commun.....	136
4.11.7.2	Panneau Objets: Structure.....	137
4.11.7.3	Panneau Objets: Traits & Flèches.....	138
4.11.7.4	Panneau Objets: Formes.....	138
4.11.7.5	Panneau Objets: Texte.....	139
4.11.7.6	Panneau Objets: Spectre NMR.....	141
4.11.7.7	Panneau Objets: Spectre.....	142
4.11.7.8	Panneau Objets: Spectre 2D.....	143

4.11.7.9	Panneau Objets: Tableau.....	145
4.11.8	Panneau Organisateur de style.....	146
4.11.8.1	Boîte de dialogue Enregistrer le style utilisateur	147
4.11.9	Générer sous-menu.....	148
4.11.10	Rechercher structure—Version Commerciale uniquement!.....	148
4.12	Menu Objet.....	148
4.12.1	Regrouper/Séparer.....	148
4.12.2	Amener vers l'avant.....	149
4.12.3	Envoyer vers l'arrière.....	149
4.12.4	Renverser de gauche à droite.....	149
4.12.5	Renverser de haut en bas.....	149
4.12.6	Faire pivoter à 90°.....	150
4.12.7	Aligner horizontalement > Gauche/Centre/Droite.....	150
4.12.8	Aligner verticalement > Haut/Centre/Bas.....	150
4.12.9	Ajuster horizontalement.....	150
4.12.10	Ajuster verticalement.....	150
4.12.11	Convertir en traits de forme variable.....	151
4.12.12	Relier les traits.....	151
4.13	Menu Modèles.....	151
4.14	Menu Options.....	151
4.15	Menu Documents.....	151
4.16	Menu I-Lab.....	151
4.17	Menu ACD/Labs.....	151
4.18	Menu Aide.....	152
Annexe A. Lancer ACD/ChemSketch à partir de la ligne de commande.....		153
Annexe B. Propriétés Calculées.....		154
	Vue d'ensemble.....	154
	Algorithmes pour le calcul des propriétés.....	154
	Volume molaire, MV	155
	Réfractivité molaire, MR	155
	Parachore, P_r	155
	Densité, d	155
	Indice de réfraction, n	156
	Tension de surface, γ	156
	Constante diélectrique, ϵ (Permittivité).....	156
	Polarisabilité.....	156
	Masses mono isotopique, nominale et moyenne.....	156
	Statistiques de corrélation avec les données expérimentales	156
	Distribution de l'erreur de prédiction de la réfractivité molaire.....	156
	Distribution de l'erreur de prédiction du volume molaire.....	157
	Distribution de l'erreur de prédiction du parachore.....	157
	Distribution de l'erreur de prédiction de l'indice de réfraction.....	158
	Distribution de l'erreur de prédiction de la densité.....	158
	Distribution de l'erreur de prédiction de la tension de surface.....	159
	Distribution de l'erreur d'estimation de la constante diélectrique (Permittivité).....	159
Annexe C. Bonus.....		161
	Que sont les "Bonus"?.....	161
	Où les obtenir?.....	161
	Bonus.....	161

Avant de Commencer

Merci d'avoir acheté ACD/ChemSketch, un programme avec logiciel intégré produit par Advanced Chemistry Development, Inc., (ACD/Labs) pour le dessin de structures chimiques, réactions et diagrammes, et la conception de rapports et présentations liés à la chimie.

A propos de ce manuel de référence

Ce manuel fournit une description complète de toutes les options disponibles dans ACD/ChemSketch. Il peut être utilisé en ligne, ou imprimé pour être utilisé dans sa version papier.

Les impressions d'écran présentes dans ce manuel de référence ont été effectuées dans une taille d'écran relativement petite.

Les couleurs et autres propriétés des éléments affichés à l'écran décrits dans ce manuel correspondent aux propriétés d'affichage des fenêtres par défaut.

Ce manuel de référence est disponible sous forme électronique et lisible avec le logiciel Adobe Acrobat. Si vous ne trouvez pas la rubrique d'index que vous cherchez, vous devez effectuer une recherche par mot-clé du mot ou de l'expression appropriés, ou des mots liés au sujet.

Conventions de souris

Il vous est possible d'effectuer plusieurs opérations durant votre travail avec ce logiciel ; le vocabulaire spécifique suivant est utilisé pour les décrire :

- **Pointer** signifie placer le pointeur de la souris sur un objet.
- **Cliquer** ou clic gauche signifie placer le pointeur sur un objet, et cliquer sur le bouton gauche de la souris.
- **Clic droit** signifie placer le pointeur sur un objet, et cliquer sur le bouton droit de la souris.
- **Double clic** signifie placer le pointeur sur un objet, et cliquer sur le bouton gauche de la souris rapidement deux fois.
- **Faire glisser** signifie placer le pointeur sur un objet, et appuyer et maintenir enfoncé le bouton gauche de la souris en déplaçant l'objet.
- **Sélectionner** signifie surligner ou rendre un élément de l'interface actif soit en cliquant dessus soit en faisant glisser le pointeur dessus (d'autres opérations possibles sont spécifiées dans la documentation). Si cette opération est effectuée dans « Sélectionner la case », la case devrait apparaître avec une marque (contrairement à « Désélectionner la case » où la case devrait être vide, sans marque).

Pour plus d'informations...

Pour être informé des nouveautés en matière de logiciels et de services fournis par ACD/Labs, veuillez consulter notre site Web sur

<http://www.acdlabs.com/>

Notre site Web est consulté des dizaines de milliers de fois par jour. Il y a une bonne raison à cela: il y a beaucoup à gagner de notre site Web. Depuis l'automne 2006, nous fournissons ChemSketch 10.0 gratuitement, un complément ISIS 3D gratuit, des extensions ChemDraw gratuites, et une clé de démonstration gratuite de deux semaines pour des sessions "Laboratoire Interactif" dans lesquelles vous pouvez effectuer des calculs tests en utilisant des applets Java sans acheter le logiciel. Sont disponibles des films TechSmith basés sur Camtasia qui montrent le fonctionnement de nombre de nos logiciels (ChemSketch en particulier) disponibles pour le téléchargement.

Les informations disponibles sur notre site Web sont constamment mises à jour. Le site Web vous renseignera sur les conférences scientifiques comportant un stand ACD/Labs. Vous pouvez consulter la page des Questions les plus Fréquentes ou « tchatcher » dans notre groupe de discussion, également accessible depuis notre page Web.

Pour être tenu informé des dernières évolutions en matière de logiciel de chimie par ACD/Labs, inscrivez-vous sur notre page Web à la liste de diffusion par email:

<http://www.acdlabs.com/feedback/mailling.html>

Pour participer aux forums de discussion ACD/Labs, rendez-vous sur:

<http://forum.acdlabs.com>

Comment nous contacter

Vous pouvez nous contacter par notre site Web, par téléphone, fax et courrier, mais la solution la plus simple reste le courrier électronique. Les questions sur les tarifs, les ventes, la disponibilité, ainsi que les questions d'ordre général doivent être adressées à:

info@acdlabs.com

Pour les questions sur l'assistance technique et scientifique rendez-vous sur:

<http://support.acdlabs.com>

Merci de nous fournir le nom de l'acheteur du logiciel, le nom du produit, le numéro de version, le numéro de série et le code licence du produit pour lequel vous nous contactez (à partir du menu **Aide**, sélectionnez **A propos de** pour trouver ces informations), ainsi qu'une description du problème que vous rencontrez. S'il y a lieu, merci de nous indiquer le nom du distributeur par lequel vous avez acheté le logiciel.

Mises à jour en ligne

Il est possible d'obtenir des mises à jour en ligne de tous les logiciels pour PC ACD/Labs. Il vous faudra vous munir des numéros d'inscription du logiciel et posséder une connexion Internet à partir de l'ordinateur sur lequel le logiciel est installé. Les mises à jour consistent en de légères modifications, comme par exemple le passage du numéro de version d'un programme de 10.00 à 10.01. Pour plus d'informations, reportez-vous au document "Mises à jour en ligne" situé dans le dossier Documents ACD/Labs, \DOCS\UP_CLNT.PDF, ou contactez notre service d'assistance technique.

1. Introduction

1.1 A propos d'ACD/ChemSketch

ACD/ChemSketch est le puissant logiciel multi-fonctions de dessin et de graphisme de chimie d'ACD/LABS conçu pour aider les chimistes à dessiner rapidement et facilement des molécules, des réactions et des diagrammes, à calculer des propriétés chimiques et à concevoir des rapports et des présentations professionnels.

ACD/ChemSketch comprend :

- **Un mode Structure** pour dessiner des structures chimiques et calculer leurs propriétés (pour plus d'informations, consulter la Partie 3 de ce manuel).
- **Un mode Dessin** pour le traitement de texte et de graphiques (pour plus d'informations, consulter la Partie 4 de ce manuel).
- **Des modules complémentaires** qui étendent les possibilités de ChemsSketch (la plupart d'entre eux doivent être achetés séparément).

1.2 Modules Complémentaires

Des applications ACD/LABS supplémentaires sont accessibles par l'interface ChemSketch, sous forme de boutons à clic unique ou d'applications complémentaires. Ces éléments, qui augmentent en nombre avec chaque mise à jour, sont proposés comme des options supplémentaires et doivent être considérés comme des articles séparés. Merci de nous contacter ou de consulter notre site Web pour plus de détails concernant les tarifs et la disponibilité.

- **ACD/ChemBasic**—le langage de programmation spéciale qui permet à l'utilisateur de personnaliser les logiciels ACD/Labs (téléchargeable sur <http://www.acdlabs.com>). ChemBasic est disponible sur notre site Web en tant que partie de la version gratuite du logiciel ChemsSketch. Pour des exemples d'utilisation de ChemBasic avec ChemSketch, reportez-vous à l'annexe C, "Bonus".
- **ACD/I-Lab**—Le service Internet qui vous permet d'obtenir un accès instantané aux bases de données chimiques et aux programmes de prédictions de propriété. Un compte sur le Laboratoire Interactif peut être créé sur <http://www.acdlabs.com/ilab>. Depuis le printemps 2005, il est possible d'obtenir une période d'essai d' I-Lab de 2 semaines. La version ChemSketch 8.0 dispose d'une connexion automatique à I-Lab si elle est utilisée sur un PC connecté à Internet (pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.17).
- **ACD/Tautomères**—vérifie et génère les formes tautomères des structures organiques les plus appropriées (inclus dans les versions gratuite et commerciale d'ACD/ChemSketch). Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.3.
- **Dictionnaire ACD**—recherche la structure moléculaire des noms de médicaments courants—**Version commerciale uniquement!** La nouvelle version du dictionnaire ACD contient plus de 125 000 noms systématiques et non systématiques, numéros d'enregistrement, et abréviations, ainsi que les structures moléculaires des substances chimiques les plus utilisées. Les entrées recouvrent plus de 220 catégories thérapeutiques, et les inhibiteurs de plus de 500 enzymes différents sont également disponibles (Le dictionnaire ACD est inclus dans la version commerciale uniquement). Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.13.6.

- **ACD/Générateur de noms gratuit**—génère un nom d'après les recommandations IUPAC sur la Nomenclature Organique, Biochimique et Minérale. Cet outil est offert comme complément gratuit à ACD/ChemSketch. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.16.

Les applications suivantes peuvent être achetées en complément d'ACD/ChemSketch :

- **ACD/Point d'ébullition et Vaporisation**—calcule les points d'ébullition exacts à n'importe quelle pression de 0,001 torr à 7600 torr, dans la plupart des cas à plus ou moins 10 degrés ou mieux, pour une structure dessinée dans la fenêtre ChemSketch. Cette application complémentaire est décrite dans le *Guide de l'utilisateur ACD/Point d'ébullition* indépendant (DOCS\BP.PDF).
- **ACD/Sigma**—affiche une estimation du type Hammett ou des paramètres liés de différents groupes de substitués dessinés dans la fenêtre ChemSketch. Cette application complémentaire est décrite dans le *Guide de l'utilisateur ACD/Sigma* indépendant (DOCS\SIGMA.PDF).
- **ACD/Nom de structure**—génère une structure moléculaire à partir de quasiment n'importe quel nom chimique saisi. ACD/Nom de structure traite la plupart des noms de composés organiques généraux et de nombreux dérivés de produits naturels selon les Recommandations IUPAC sur la Nomenclature Organique, Biochimique et Minérale. Cette application complémentaire est décrite dans le *Guide de l'utilisateur ACD/Nom de structure* indépendant (DOCS\NAMESTR.PDF).

1.3 Nouveautés de la version 10.0

ACD/ChemSketch version 10.0 comporte des modifications par rapport aux versions précédentes et inclut désormais des caractéristiques et options avancées:

1.3.1 Performances générales

- Amélioration des procédures de génération de structure à partir d'InChI qui prennent en compte les niveaux fixes d'hydrogènes et d'isotopes, permettant ainsi une représentation plus précise des structures chimiques encodées.
- Amélioration des options Nom de Structure :
 - Génération de structures à partir de noms qui ne contiennent pas d'informations sur la configuration des liaisons doubles
 - Génération de structures à partir de noms qui correspondent aux notations SMILES et InChI
- Possibilité de visualiser des informations depuis les canaux RSS.

1.3.2 Mode Structure

- Nouvelle méthode de dessin des liaisons: liaison double en demi-gras.
- Amélioration de l'apparence de la Table Périodique des Éléments :
 - l'apparence correspond désormais à la présentation recommandée par l'IUPAC.
- Images de tous les éléments chimiques stables dans la Table Périodique des Éléments.
- Génération de descripteurs stéréochimiques spéciaux pour les centres stéréochimiques potentiels et la configuration stéréochimique définie incorrectement.
- Différentes méthodes d'uniformisation
- Symboles grecs utilisés pour la numération manuelle.

1.3.3 Mode Dessin

- Possibilité d'insérer des images d'extensions .GIF et .JPEG en utilisant le bouton **Insérer Bitmap**.

1.4 Version gratuite

Depuis Avril 1999, ACD/Labs offre la version gratuite de ChemSketch par le lien "Free Stuff" sur notre site Web.

Nous offrons désormais ACD/ChemSketch 10.0 gratuitement!

Important ACD/ChemSketch version gratuite doit être installé dans un dossier indépendant. Ce dossier peut contenir d'autres logiciels gratuits ACD/Labs disponibles également mais **ne doit pas contenir de logiciels payants ACD/Labs.**

Les limites d'utilisation des versions gratuites ainsi que les questions les plus fréquemment posées (FAQs) se trouvent sur notre site Web :

http://www.acdlabs.com/products/chem_dsn_lab/chemsketch/tech.html.

Note Bien que la version gratuite ACD/ChemSketch ne vous donne pas accès à l'assistance technique, nous vous encourageons à visiter le forum d'informations Chemsketch où vous pouvez déposer vos questions ou partager vos conseils. <http://forum.acdlabs.com>

2. Vue d'ensemble de l'interface

2.1 Objectifs

Dans ce chapitre vous allez vous familiariser avec l'interface ChemSketch et ses caractéristiques de base.

Les instructions sur les configurations requises du système, ainsi que sur l'installation et la désinstallation du logiciel sont fournies sur une page indépendante, expédiée avec le logiciel lui-même.

2.2 Eléments d'interface communs

La description du programme dans ce manuel de référence contient des termes définissant diverses parties de son interface. Vous trouverez ci-dessous des informations générales concernant l'organisation de l'interface.

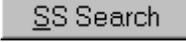
Dans la partie supérieure de chaque fenêtre, une **barre de titre** comporte le nom du programme, le nom de la fenêtre en cours et des boutons de contrôle de la taille et la position de la fenêtre (pour plus d'informations, voir la section 2.3).

Au-dessous de la barre de titre vous trouverez la **barre de menu**, qui contient les menus du programme. En cliquant sur les menus vous avez accès aux commandes du programme.

Sous la barre de menu se trouvent une ou deux **barres d'outils** contenant les boutons à utiliser lors du travail dans cette fenêtre (notez que chaque barre d'outils des programmes ACD/Labs peut être personnalisée ; pour plus d'informations, consultez la section 2.2.1). Ces barres d'outils sont spécifiques à chaque fenêtre et sont désignées par différents noms (par exemple, vous trouverez les barres d'outils Générale et Edition dans la fenêtre ChemSketch).

Espace de travail est une partie modifiable de la fenêtre dans laquelle vous travaillez (dessinez des structures, visualisez les résultats de vos manipulations, visualisez les fichiers et les bases de données ouverts, etc.). L'espace de travail peut être divisé en plusieurs micro fenêtres, chacune affichant un type de données spécifique.

Au-dessous de l'espace de travail se trouve généralement une **barre d'état** comportant des informations pouvant être utiles à votre travail en cours, par exemple le nom du fichier ouvert en cours, la position du curseur dans l'espace de travail, etc.

Si ACD/ChemSketch est lancé à partir d'un autre programme ACD/Labs, au bas de chaque fenêtre la **barre de Changement de Fenêtre** comporte des boutons pour le passage d'une fenêtre du programme à une autre et pour l'exécution d'actions spécifiques qui aboutissent au passage à une autre fenêtre. Par exemple, le fait de cliquer sur **Recherche de Substructure**  lance la recherche de substructure et a pour résultat de passer automatiquement à la fenêtre Base de Données affichant le résultat de recherche.

2.2.1 Personnalisation de la barre d'outils

Les barres d'outils de chaque programme ACD/Labs peuvent être personnalisées par un clic droit sur la barre d'outils. Les options suivantes sont disponibles dans le menu contextuel qui apparaît.

- Les boutons de la barre d'outils : vous pouvez annuler la sélection d'un bouton pour le masquer.
- **Barre d'outils Reset**: sélectionne tous les boutons de barre d'outils dans la liste.

Si certains des boutons ne tiennent pas, **More Buttons**  apparaît dans la barre d'outils. Certaines des barres d'outils affichent le menu raccourci comprenant les commandes supplémentaires suivantes:

- **Style Chevron**: ajoute des boutons supplémentaires  à l'extrémité de la barre d'outils si les boutons ne tiennent pas sur la barre d'outils.
- **Style Wrap**: coupe la barre d'outils en deux parties (l'une au-dessous de l'autre) si les boutons ne tiennent pas sur la barre d'outils.
- **Style d'Echelle Gris**: active/désactive la coloration des boutons de la barre d'outils.
- **Surbrillance Colorée**: active/désactive la coloration des boutons sélectionnés (lorsqu'un clic est effectué sur un bouton ou que le pointeur de la souris est placé sur un bouton).

2.3 Barre de Titre

La partie supérieure de la fenêtre comporte une barre de titre affichant le nom du programme, le nom de la fenêtre actuelle, le nom et l'origine du fichier actuellement ouvert (le nom de fichier par défaut est NONAMEXX.SK2, où 'XX' est le numéro ordinal d'un fichier commençant à 00), ainsi que trois petits boutons de contrôle de la taille et de la position de la fenêtre. Si la fenêtre ne remplit pas l'écran entier, faire glisser la barre de titre déplacera la fenêtre sans en changer la taille.

Cliquez sur l'icône du programme dans la partie gauche de la barre pour visualiser les commandes de contrôle de la fenêtre. Certains d'entre eux sont présents sur la barre de titre sous la forme suivante :

Boutons	Description
	Bouton Réduire —réduit la fenêtre. Notez que cette option n'est disponible que si la fenêtre n'est pas déjà réduite.
	Bouton Restorer —rétablit la taille de fenêtre précédente. Notez que cette option n'est disponible que si la fenêtre est agrandie.
	Bouton Agrandir —pour que la fenêtre remplisse l'intégralité de l'écran. Notez que cette option n'est disponible que si le bureau ou la fenêtre n'est pas déjà agrandi.
	Bouton Fermer —ferme tous les documents ouverts. Si vous avez apporté des modifications au document ouvert et n'avez pas encore enregistré votre travail, le programme vous invite à le faire.

Boutons	Description
	Boîte Menu de Contrôle —affiche le menu de raccourci avec les commandes listées ci-dessus.

2.4 Palette de couleurs

La palette de couleurs est affichée horizontalement sous l'espace de travail et permet de changer la couleur des objets sélectionnés.

Vous pouvez afficher/masquer la palette de couleurs en sélectionnant/désélectionnant la case **Palette** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) ou en sélectionnant **Afficher la Palette** dans le menu **Options**.

Pour afficher des couleurs supplémentaires, cliquez sur **More** sur la droite de la palette.

Pour modifier la couleur des objets sélectionnés, cliquez sur la couleur choisie dans la palette de couleurs en suivant les principes suivants :

- Dans le mode Structure, le fait de cliquer dans la boîte de couleurs modifie la couleur des *atomes* sélectionnés, et un clic droit dans la boîte de couleurs modifie la couleur des *liaisons* sélectionnées.
- Dans le mode Dessin, un clic dans la boîte de couleurs modifie la couleur de *remplissage* des objets sélectionnés, et un clic droit dans la boîte de couleurs modifie la couleur de *crayon* des objets sélectionnés.

2.5 Barre Informations RSS—**Nouveauté 10.0!**

La barre Informations RSS est une ligne affichée au-dessus de la barre d'état et qui comporte la liste des dernières informations en provenance d'ACD/Labs ainsi que des Rapports de Réaction et tous les autres canaux RSS de votre choix.

Vous pouvez afficher/masquer la barre Informations RSS en sélectionnant/désélectionnant la case RSS dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**), ou en sélectionnant **Afficher RSS** dans le menu **Options**.

Note La barre Informations RSS peut être masquée **uniquement dans la version commerciale !**

2.5.1 Boîte de dialogue Canaux RSS

Cette boîte de dialogue vous permet d'ajouter ou supprimer des canaux RSS, ainsi que de configurer les options d'affichage des lignes d'apparition des informations.

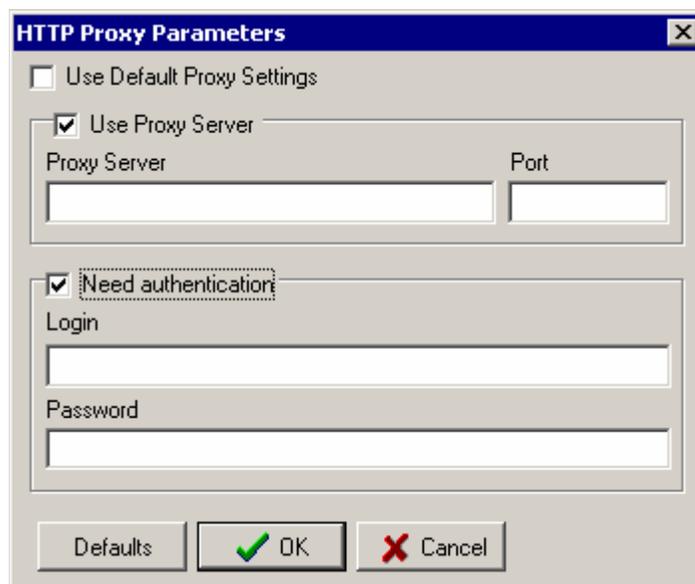
Pour afficher cette boîte de dialogue, cliquez sur dans la barre Informations RSS.



Option	Description
Canaux RSS	Affiche une liste de canaux RSS. Sélectionnez les cases des canaux que vous souhaitez afficher. Notez que les informations ACD/Labs et les Rapports de Réaction ne peuvent être désactivés.
	Cliquez sur ce bouton pour ajouter une nouvelle URL à la liste des Canaux RSS .
	Cliquez sur ce bouton pour supprimer la rangée de canaux requis actuellement affichée en surbrillance dans la liste des Canaux RSS . Notez que vous ne pouvez supprimer les canaux Personnes à Réaction et Informations ACD/Labs.
Mettre à jour toutes les...min.	Spécifiez l'intervalle de renouvellement des informations (entre 1 et 120 minutes).
Défilement des objets	Sélectionnez cette case pour obtenir un défilement continu de la barre Informations RSS. Si cette case n'est pas sélectionnée, la barre défile avec des pauses de plusieurs secondes.
Vitesse de défilement	Déplacez le curseur de défilement vers la gauche ou la droite pour régler la vitesse de défilement.
	Affiche la boîte de dialogue Paramètres de Proxy HTTP . Pour plus d'informations voir la Section Error! Reference source not found.
	Cliquez sur ce bouton pour appliquer les réglages choisis sans fermer la boîte de dialogue.

2.5.2 Boîte de dialogue Paramètres de Proxy HTTP

Cette boîte de dialogue permet de choisir les paramètres du Serveur Proxy if ce dernier est requis. Pour afficher cette boîte de dialogue, cliquez sur **Proxy**  dans la boîte de dialogue **Canaux RSS**.

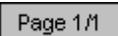
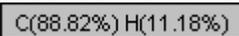
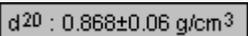
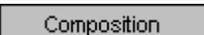
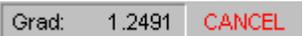


Option	Description
Utiliser les Paramètres Proxy par Défaut	Sélectionnez cette case pour utiliser les paramètres par défaut du Serveur Proxy choisis dans Internet Explorer.
Utiliser Serveur Proxy	Sélectionnez cette case pour spécifier l'adresse IP et le numéro du port du Serveur Proxy de votre réseau local.
Authentification requise	Sélectionnez cette case pour inscrire les clés d'accès du Serveur Proxy dans les cases Login et Password .
	Cliquez sur ce bouton pour appliquer les paramètres par défaut du Serveur Proxy spécifiés dans Internet Explorer.

2.6 Barre d'Etat

La barre d'état est affichée horizontalement au bas de la fenêtre Window, sous la palette de couleur. Elle contient grand nombre d'informations utiles :

Élément	Fonction
	Indicateurs ACD/I-Lab. Pour plus d'informations, reportez-vous à la documentation technique sur ACD/I-Lab.
	Permet d'accéder à ACD/I-Lab.
	Affiche votre solde I-Lab en cours.
	Affiche le nom du document en cours (également affiché sur la barre de titre).

Élément	Fonction
	Affiche l'état du document: modifié ou non.
	Affiche la page précédente du document en cours (s'il y a lieu).
	Affiche le numéro de la page en cours/le nombre de pages du document. Un clic sur ce bouton affiche la liste de toutes les pages.
	Affiche la page suivante du document en cours (s'il y a lieu).
	Dans le mode Structure, affiche le nombre de fragments dans l'espace de travail, ou le nombre de fragments sélectionnés.
	Dans le mode Structure, affiche la formule moléculaire du fragment ou de la structure sélectionnés (si c'est le cas) ou le nombre total d'éléments actuellement présents sur la page (si aucun fragment ni structure n'est sélectionné). Notez que si la propriété Composition est sélectionnée (voir ci-dessous), cette case affiche le ratio en pourcentage des atomes dessinés des éléments: 
	Dans le mode Structure, affiche la propriété actuellement sélectionnée calculée pour la structure dessinée.
	Dans le mode Structure, affiche un menu de différentes propriétés de la structure actuellement affichée. Sélectionnez l'une des propriétés et les informations sont fournies dans la case spéciale sur la barre d'état (voir ci-dessus). Notez que ce bouton porte le nom de la propriété actuellement affichée dans la case Propriétés . Lorsqu'une propriété différente est sélectionnée, l'étiquette du bouton change de manière correspondante.
	Dans le mode Structure, au cours de l'optimisation 3D, affiche la progression de l'optimisation et vous permet de l'annuler (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section Error! Reference source not found.).

2.7 Modes Structure et Dessin

Au démarrage d'ACD/ChemSketch, de nombreuses commandes de menu et boutons de barres d'outils apparaissent sombres (inactifs). Ils seront opérationnels à partir du moment où vous dessinerez une structure.

La fenêtre ChemSketch comporte deux modes, **Structure** et **Dessin**. Vous passez de l'un à l'autre en utilisant les boutons de la barre d'outils Générale :



Dans le mode Structure vous dessinez des structures et des déroulements de réaction, tandis que le mode Dessin présente les outils pour la saisie de texte et le dessin de divers objets graphiques. Les éléments d'interface dans ces modes diffèrent.

Pour plus d'informations sur les modes de travail d'ACD/ChemSketch, consultez les chapitres qui suivent.

3. Mode Structure

3.1 Objectifs

Ce chapitre vous familiarise avec:

- Les performances générales du mode Structure;
- L'interface du mode Structure en un coup d'oeil;
- Une description détaillée de chaque commande, outil, et partie de l'interface disponibles dans le mode Structure.

Pour passer au mode Structure, cliquez sur **Structure**  dans la barre d'outil générale.

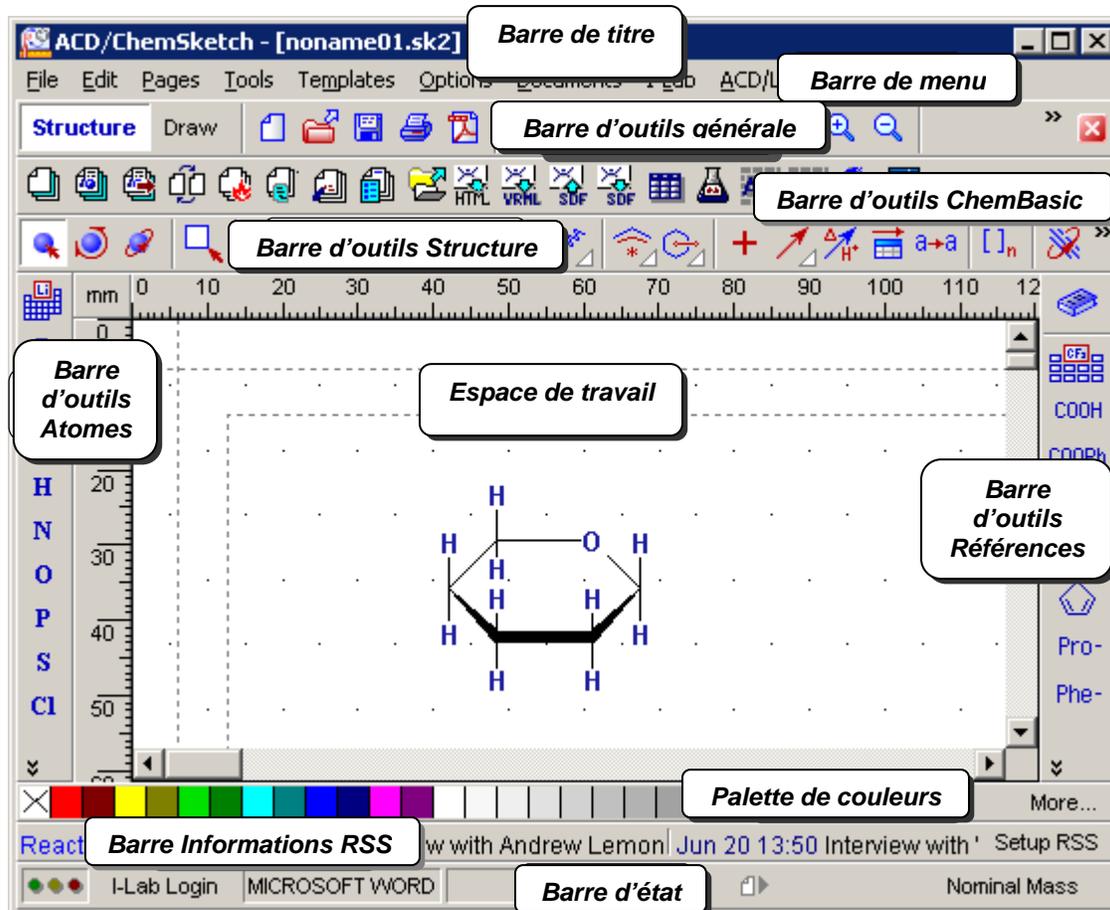
3.2 Informations générales

Vous pouvez utiliser le mode Structure pour les fonctions suivantes :

- Dessiner des structures chimiques en utilisant les boutons situés sur les différentes barres d'outils de la fenêtre ChemSketch.
- Voir instantanément soit la composition élémentaire, soit la formule et le poids de formule de la ou des structures dessinées ou les propriétés chimiques de la structure sélectionnée sur la barre d'état.
- Calculer la réfractivité molaire, le volume molaire, le parachore, l'indice de réfraction, la tension de surface, la densité, ainsi que d'autres propriétés physico-chimiques de la structure sélectionnée. Vous pouvez copier les résultats de calculs dans la fenêtre ChemSketch.
- Trouver des structures chimiques d'après leur nom systématique ou non systématique, leur catégorie thérapeutique ou leur enzyme inhibé en utilisant le dictionnaire ACD intégré (inclus uniquement dans la version commerciale). Vous pouvez également dessiner une structure et voir tous ses noms, type de catégorie thérapeutique, et enzymes inhibés, listés dans le dictionnaire ACD.
- Retrouver des données de référence NMR et Masse depuis la version élargie de la Table Périodique des Eléments.
- Passer en revue les formes tautomères de la structure dessinée les plus appropriées et corriger automatiquement la structure en utilisant la fonction intégrée **Formes Tautomères** sur la barre d'outil Structure.
- Convertir des structures 2D en leur équivalent 3D et les visualiser, les mesurer, et les manipuler virtuellement en 3D.
- Produire une version uniformisée d'une structure.
- Dessiner des réactions chimiques et étiqueter des flèches de réaction pour simplifier l'édition de conditions expérimentales spécifiques. Associez les atomes d'un réactant pour produire des schémas avec le mapping atome-atome.
- Sauvegarder ou entrer des structures vers ou à partir d'un fichier sur le disque, exporter ou importer des structures vers ou à partir de fichiers mols MDL, couper et coller des structures vers d'autres applications Windows, en utilisant les commandes du menu **Fichier**.

3.3 Ecran

Ci-dessous est présenté l'écran avec le mode Structure activé. Les noms et positions des barres d'outils et d'autres éléments utilisés dans le manuel sont présentés.

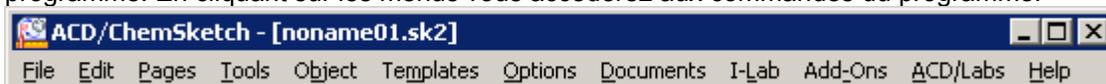


Le tableau suivant présente une brève description de chaque élément de l'interface identifié dans l'image ci-dessus:

Élément de l'interface	Fonction
Barre Titre	Cette barre présente le nom du programme, le nom et l'emplacement du fichier ouvert en cours, et des boutons de contrôle de la taille et de la position de la fenêtre (pour plus d'informations sur la barre de titre, reportez-vous à la Section 2.3).
Barre Menu	Cette barre contient une série de mots. Chaque mot renvoie à une liste ('menu') des commandes correspondantes pour travailler dans la fenêtre ChemSketch dans le mode Structure (pour une description détaillée de chaque menu et des commandes qu'il contient, reportez-vous aux Sections 3.9-3.19).
Barre d'outils Générale	Cette barre d'outils comprend des outils présents à la fois dans le mode Structure et Dessin et vous aidera dans des tâches communes aux deux modes telles que: sauvegarder, ouvrir des fichiers, annuler/rétablir des opérations, copier et coller, effectuer des zooms avant et arrière, ainsi qu'insérer divers modèles (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.5).
Barre d'outils ChemBasic	Cette barre d'outils comprend des outils supplémentaires qui étendent la fonctionnalité d'ACD/ChemSketch. Notez que la barre d'outils ChemBasic est présente à la fois dans le mode Structure et Dessin si vous avez précédemment installé des outils Bonus (pour plus d'informations, reportez-vous à l'Annexe C).
Barre d'outils Structure	Cette barre d'outils est présente uniquement dans le mode Structure. Elle contient des outils de dessin et de manipulation des structures chimiques (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.6).
Barre d'outils Atomes	Cette barre d'outils contient des boutons représentant des atomes, ainsi que des outils pour changer les propriétés des atomes (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.7).
Barre d'outils Référence	Cette barre d'outils contient la Table des Radicaux et divers boutons représentant des radicaux préformés à sélectionner dans la table. Cette barre d'outils donne également accès au dictionnaire ACD (version commerciale uniquement !). Pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.8.
Espace Travail	L'espace de travail est la page ChemSketch actuellement ouverte où vous pouvez dessiner et éditer les objets choisis (structures, réactions, images).
Palette de couleurs	Vous permet de colorer rapidement les atomes et les liaisons dans les structures chimiques sélectionnées (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 2.4).
Barre d'état	Cette barre contient des informations qui peuvent être utiles pendant le travail en cours: nom du fichier .SK2 ouvert, numéro de page, formule moléculaire de la structure sélectionnée, etc. Elle contient également un bouton d'accès automatique à I-Lab. Pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 2.6.

3.4 Barre Menu

Juste au-dessous de la barre de titre, vous trouverez la barre Menu qui contient les menus du programme. En cliquant sur les menus vous accédez aux commandes du programme.

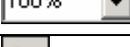


Pour obtenir des informations détaillées sur les commandes disponibles à partir des menus de la fenêtre ChemSketch dans le mode Structure, reportez-vous aux Sections 3.9-3.19.

3.5 Barre d'outils Générale

Dans chacun des modes Structure et Dessin, la barre d'outils générale est affichée sous la barre Menu. La barre d'outils générale contient des boutons pour ouvrir et fermer des fichiers, annuler/rétablir des actions, couper/copier/coller, et zoomer. La plupart des boutons de cette barre d'outils sont des raccourcis des commandes de menu; les autres boutons sont des outils n'ayant pas de commande menu correspondante.

Le tableau ci-dessous fournit une brève description de tous les boutons disponibles dans la barre d'outils Générale :

Bouton	Fonction	Commande Menu
	Passe au mode Structure.	Pas de commande menu correspondante.
	Passe au mode Dessin (pour plus d'informations sur ce mode, voir la Section 4.	Pas de commande menu correspondante.
Vous pouvez également appuyer sur la BARRE ESPACE pour passer de l'un à l'autre des modes.		
	Ajout d'une nouvelle page vide à la fin du document en cours (voir la Section 3.11.1).	Commande New (menu Pages)
	Affiche la boîte de dialogue Open où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement d'un fichier .SK2 à ouvrir (voir la Section 3.9.2).	Commande Open (menu File)
	Enregistre le document actuellement ouvert. Lorsque vous enregistrez votre travail pour la première fois, la boîte de dialogue Save Document As vous invite à indiquer le nom de fichier et son emplacement (voir les Sections 3.9.4-3.9.5).	Commande Save ou Save As (menu File)
	Affiche la boîte de dialogue Print où vous pouvez indiquer les paramètres souhaités pour l'impression du document en cours (voir la Section 3.9.12).	Commande Print (menu File)
	Affiche la boîte de dialogue Export où vous pouvez indiquer le nom et l'emplacement d'un fichier PDF Adobe vers lequel vous souhaitez exporter le document en cours (voir la Section 3.9.7).	Commande Export (menu File)
	Annule la dernière opération (voir la Section 3.10.1).	Commande Undo (menu Edit)
	Rétablit la dernière opération annulée (voir la Section 3.10.2).	Commande Redo (menu Edit)
	Active l'outil Delete qui permet de supprimer des objets spécifiques dans l'espace de travail (voir la Section 3.5.1).	Pas de commande menu correspondante.
	Retire l'objet sélectionné de l'espace de travail et le place dans le presse-papier (voir la Section 3.10.3).	Commande Cut (menu Edit)
	Copie l'objet sélectionné dans le presse-papier (voir la Section 3.10.4).	Commande Copy (menu Edit)
	Permet d'insérer le contenu du presse-papier dans l'espace de travail (voir la Section 3.10.5).	Commande Paste > Default (menu Edit)
	Active l'outil Zoom In qui permet d'obtenir une vue rapprochée des objets (voir la Section 3.5.2).	Pas de commande menu correspondante.
	Réduit l'affichage des objets selon le facteur prédéfini (voir la Section 3.5.3).	Pas de commande menu correspondante.
	Permet de contrôler l'échelle de l'image (voir la Section 3.5.4).	Pas de commande menu correspondante.
	Règle l'affichage de l'espace de travail sur 100% (voir la Section 3.5.4).	Pas de commande menu correspondante.
	Affiche la page en cours dans sa pleine largeur et pleine hauteur dans l'espace de travail (voir la Section 3.5.4).	Pas de commande menu correspondante.
	Ajuste tous les objets de la page ChemSketch en cours à l'espace de travail (voir la Section 3.5.4).	Pas de commande menu correspondante.
	Ajuste les objets sélectionnés à l'affichage de l'espace de travail (voir la Section 3.5.4).	Pas de commande menu correspondante.

Les fonctions zoom avant et zoom arrière redimensionnent l'affichage des objets sur l'écran, mais n'affectent pas la taille réelle des objets. Pour redimensionner des objets, utilisez l'outil **Select/Move/Resize**  (mode

Bouton	Fonction	Commande Menu
	Dessin) ou l'outil Select/Rotate/Resize  (mode Structure).	
	Affiche la boîte de dialogue Fenêtre Modèle qui contient les modèles prédéfinis et les modèles définis par l'utilisateur pour simplifier le dessin des structures (voir la Section 3.13.1).	Commande Template (Menu Templates)
	Affiche la boîte de dialogue Recherche Structure qui permet de trouver les structures souhaitées dans vos fichiers sans les ouvrir (voir la Section 3.12.25). Version commerciale uniquement !	Commande Search for Structure (Menu Tools)
	Génère le nom de la ou des structures sélectionnées (voir la Section 3.12.16).	Commande Generate > Name for Structure (menu Tools)
	Affiche la boîte de dialogue ACD/Nom de Structure qui permet de générer des structures à partir de noms (voir la Section 3.12.17).	Commande Generate > Structure from Name (menu Tools)
	Lance le module ACD/3D Viewer (voir la Section 3.5.5).	Pas de commande menu correspondante.
	Ferme le document actif (voir la Section 3.9.3).	Commande Close (Menu File)

Note Les barres d'outils de chaque programme ACD/Labs peuvent être personnalisées en utilisant le menu raccourci de la barre d'outils (pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.)

3.5.1 Bouton Supprimer

Ce bouton active l'outil **Supprimer** qui permet de retirer des objets de l'espace de travail. Notez que cet outil fonctionne différemment dans les modes Structure et Dessin.

Mode Structure

Dans ce mode, vous pouvez supprimer à la fois des structures chimiques entières ou des objets graphiques et les fragments structuraux ou les atomes simples ou liaisons.

Note Pour pouvoir sélectionner et supprimer les objets créés dans le mode Dessin, ainsi que les plus et les flèches de réaction, sélectionnez la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**).

Pour supprimer un atome ou un objet:

- Cliquez sur **Supprimer**  pour activer l'outil correspondant, puis cliquez sur un atome ou une liaison que vous souhaitez supprimer.

L'outil **Supprimer** supprime l'atome désigné ainsi que la liaison adjacente. Il ne laisse jamais d'atomes simples dans l'espace de travail. Toutefois, vous pouvez conserver des parties d'une molécule; maintenez la touche CTRL enfoncée et cliquez sur un atome lié (par exemple l'atome central de l'isobutène). Seul l'atome sur lequel vous cliquez disparaît; tous les autres atomes sont conservés.

L'outil **Supprimer** supprime la liaison désignée. Si un atome simple subsiste après le processus de suppression, il est également supprimé. Toutefois, vous pouvez conserver tous les atomes simples si vous maintenez la touche CTRL enfoncée en utilisant l'outil **Supprimer**.

Pour supprimer un fragment structurel :

1. Activez l'outil **Supprimer** et effectuez un glissé sur le fragment que vous souhaitez supprimer afin que les carrés de sélection apparaissent.
2. Pointez sur l'un des noeuds de sélection pour qu'il devienne noir et cliquez dessus.

Astuce Pour supprimer plusieurs fragments en une fois, maintenez la touche CTRL enfoncée en les sélectionnant, puis relâchez CTRL, pointez sur l'un des noeuds de sélection pour qu'ils deviennent noirs, puis cliquez dessus.

Pour supprimer une ou des structures entières:

1. Activez l'outil **Delete** et effectuez un glissé sur la ou les structures que vous souhaitez supprimer afin que les carrés de sélection apparaissent.
2. Pointez sur l'un des noeuds de sélection pour qu'il devienne noir et cliquez dessus.

Astuce Pour supprimer les objets sélectionnés vous pouvez également utiliser la commande **Supprimer** (menu **Edition**). Notez que cette commande n'est disponible que s'il une sélection est faite.

Mode Dessin

Dans ce mode, vous pouvez supprimer des structures chimiques entières et des objets graphiques.

Pour supprimer un objet:

1. Cliquez sur **Supprimer**  pour activer l'outil correspondant. Notez que dans ce cas le curseur se transforme en flèche étiquetée **Del** .

2. Pointez sur l'objet que vous souhaitez supprimer pour que les contours apparaissent autour de lui, puis cliquez dessus.

Pour supprimer plusieurs objets en une fois:

1. Activez l'outil **Supprimer** et effectuez un glissé sur les objets que vous souhaitez supprimer afin que les carrés de sélection apparaissent.
2. Pointez sur l'un des objets sélectionnés pour que les contours apparaissent autour de tous les objets sélectionnés, puis cliquez dessus.

Note Pour supprimer une partie d'une structure, passez au mode Structure et suivez les principes susmentionnés.

3.5.2 Bouton Zoom Avant

Ce bouton  active l'outil **Zoom Avant** qui permet d'agrandir la portion de l'espace de travail souhaitée. Lorsque vous cliquez sur ce bouton, le curseur se transforme en loupe. Vous pouvez procéder de l'une des façons suivantes :

- cliquez dans l'espace de travail. Ceci élargit l'affichage des objets de leur taille actuelle jusqu'à l'échelle prédéfinie suivante (voir la liste de la case de contrôle du zoom) et les centre sur l'écran.
- Sélectionnez la zone que vous souhaitez agrandir en effectuant un glissé dessus. La zone sélectionnée sera ajustée à l'affichage de l'espace de travail.

Pour revenir à la vue précédente du fragment, utilisez l'outil **Zoom Arrière** .

Important Cette fonction redimensionne l'affichage des objets sur l'écran, mais n'affecte pas la taille réelle des objets. Pour redimensionner des objets, utilisez l'outil

Sélectionner/Pivoter/Redimensionner  (mode Structure) ou l'outil

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner  (mode Dessin).

3.5.3 Bouton Zoom Arrière

Ce bouton  active l'outil **Zoom Out** qui permet de réduire l'affichage des objets de leur taille actuelle à un facteur prédéfini chaque fois que vous cliquez sur ce bouton.

Pour agrandir un objet, cliquez sur **Zoom Avant**  dans la barre d'outils Générale.

Pour agrandir l'écran à des dimensions spécifiques, utilisez les outils **Taille Réelle** , **Page Entière** , **Ajuster Tout** , ou **Ajuster la Sélection**  (pour plus d'informations, reportez-vous à la section suivante).

Important Cette fonction redimensionne l'affichage des objets sur l'écran, mais n'affecte pas la taille réelle des objets. Pour redimensionner les objets, utilisez l'outil

Sélectionner/Pivoter/Redimensionner  (mode Structure), ou l'outil

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner  (mode Dessin).

3.5.4 Case Zoom et boutons de dimensionnement de l'image

Cette case contrôle la dimension des images. Choisissez le pourcentage d'augmentation ou de diminution dans la liste déroulante.

Important Cette fonction redimensionne l'affichage des objets sur l'écran, mais n'affecte pas la taille réelle des objets. Pour redimensionner les objets, utilisez l'outil

Sélectionner/Pivoter/Redimensionner  (mode Structure), ou l'outil

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner  (mode Dessin).

Vous pouvez dans cette case sélectionner l'une des options suivantes:

Option	Description	Bouton
Page Entière	affiche la page en cours dans la pleine largeur et pleine hauteur de l'espace de travail.	
Largeur de Page	affiche la page en cours dans la pleine largeur de l'espace de travail.	
Ajuster la Sélection	ajuste les objets sélectionnés à l'espace de travail.	
Ajuster Tout	ajuste tous les objets de la page ChemSketch en cours à l'espace de travail.	
<i>Echelle d'agrandissement</i>	Sélectionnez l'une des valeurs d'agrandissement: 25%, 50%, 75%, 100% (Taille Réelle ) , 150%, 200% and 400% pour agrandir ou réduire l'affichage.	
Astuce	Vous pouvez également saisir manuellement la valeur du pourcentage dans la case. La valeur minimale disponible est de 10 et l'agrandissement maximal de 500. Pour saisir votre propre valeur, cliquez simplement dans la case, entrez la valeur, puis appuyez sur la touche ENTREE.	

3.5.5 Bouton Visualisation 3D

Ce bouton démarre ACD/3D Viewer, un programme rapide mais précis de modélisation et de visualisation 3D. Il est entièrement intégré à ACD/ChemSketch, vous permettant de dessiner des structures 2D et d'obtenir rapidement leur représentation 3D dans un affichage de 16 couleurs. Pour plus d'informations, reportez-vous au *Guide de l'utilisateur ACD/3D Viewer* situé dans le dossier de documentation ACD/Labs (\\DOCS\3D.PDF).

3.6 Barre d'outils Structure

Dans le mode Structure, la barre d'outils Structure est affichée sous la barre d'outils Générale. Elle contient les boutons que vous pouvez utiliser pour le dessin des structures chimiques.

Le tableau suivant liste tous les boutons disponibles dans la barre d'outils Structure et fournit pour chacun une brève description :

Bouton	Description
	Permet de sélectionner et de déplacer des objets dans l'espace de travail (voir la Section 3.6.1).
	Permet de sélectionner, déplacer et pivoter des objets dans l'espace de travail (voir la Section 3.6.2).
	Permet de pivoter la structure ou le fragment sélectionné en 3D (voir la Section 3.6.3).
	Passe d'un mode de sélection à un autre : lasso et case rectangulaire (voir la Section 3.6.4).
	Permet de dessiner des liaisons (voir la Section 3.6.5).
	Permet de dessiner des liaisons en continu (voir la Section 3.6.6).
	Permet de dessiner des chaînes (voir la Section 3.6.7).
	Permet de dessiner des liaisons stéréo vues de l'avant (voir la Section 3.6.8).
	Permet de dessiner des liaisons stéréo vues de l'arrière (voir la Section 3.6.9).
	Permet de dessiner différentes liaisons de coordination (voir la Section 3.6.10). 

Bouton	Description
	Permet de dessiner des liaisons de certains types particuliers (voir la Section 3.6.11). 
	Permet de dessiner des liaisons délocalisées (voir la Section 3.6.12). 
	Permet de dessiner des liaisons de Markush (voir la Section 3.6.13). 
	Permet de dessiner des plus de réaction (voir la Section 3.6.14).
	Permet de dessiner des flèches de réactions. Un clic sur le triangle blanc du bouton affiche des possibilités de flèches supplémentaires (voir la Section 3.6.15). 
	Permet d'étiqueter les flèches de réaction (voir la Section 3.6.16).
	Permet de calculer automatiquement des données de synthèse pour chaque composé de réaction (voir la Section 3.6.17).
	Permet d'établir une mappe d'une réaction dessinée, manuellement ou automatiquement (voir la Section 3.6.18).
	Permet de dessiner des polymères (voir la Section 3.6.19).
	Permet de modifier la disposition d'une liaison double, la position de l'hydrogène, le point d'intersection des liaisons, et le point de connexion d'une étiquette d'atome (voir la Section 3.6.20).
	Permet de faire pivoter une structure chimique pour qu'une liaison déterminée devienne horizontale (voir la Section 3.6.21).
	Permet de faire pivoter une structure chimique pour qu'une liaison déterminée s'affiche en vertical (voir la Section 3.6.22).
	Permet de retourner une structure chimique ou un fragment sélectionné sur l'axe d'une liaison déterminée (voir la Section 3.6.23).
	Fait pivoter la structure chimique sélectionnée sur son axe horizontal, pour afficher son image en miroir (voir la Section 3.6.24).
	Fait pivoter la structure chimique sélectionnée sur son axe vertical, pour afficher son image en miroir (voir la Section 3.6.25).
	Permet de créer un modèle instantané basé sur n'importe quelle structure ou fragment sélectionné, pour pouvoir l'insérer n'importe où dans l'espace de travail ou l'attacher à une autre structure (voir la Section 3.6.26).
	Redessine et redimensionne les structures chimiques sélectionnées pour uniformiser toutes les longueurs et tous les angles de liaisons (voir la Section 3.12.2).
	Vérifie et génère les formes tautomères les plus appropriées des structures organiques dessinées (voir la Section 3.12.3).
	Crée un modèle 3D à partir d'une structure chimique 2D (voir la Section 3.12.4).
	Calcule le point d'ébullition (BP), la pression de vapeur (VP), l'enthalpie de vaporisation, et le point d'inflammabilité de la structure sélectionnée (voir la Section 3.12.5).
	Calcule et affiche la masse mono isotopique de certains des fragments d'une structure (voir la Section 3.12.6).
	Calcule les différents types (par exemple inductive, résonance, méta, para etc.) de constantes électroniques— σ des substitués (voir la Section 3.6.27).

Note Les barres d'outils de chaque programme ACD/Labs peuvent être personnalisées en utilisant le menu raccourci de barre d'outils (pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1).

3.6.1 Bouton Sélectionner/Déplacer

Ce bouton  active l'outil **Sélectionner/Déplacer** qui permet de sélectionner et déplacer des atomes, des liaisons, des fragments, des structures et des objets graphiques. Vous pouvez passer rapidement du mode Select/Move au:

- Mode Dessin Normal () en appuyant sur la touche ECHAP.
- Mode Sélectionner/Pivoter/Redimensionner () en effectuant un clic droit dans l'espace de travail.

Astuce Pour pouvoir sélectionner et déplacer des objets créés dans le mode Dessin, ainsi que des « plus » et des flèches de réaction, assurez-vous que la case **Select Graphics** est sélectionnée dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) de la boîte de dialogue **Préférences**. Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, reportez-vous à la Section 3.14.1.2.

Tableau 1. Le tableau suivant résume les actions à effectuer pour sélectionner des objets (notez que l'outil **Sélectionner/Déplacer** doit être activé ):

Pour Sélectionner	Procédure
Atome ou liaison	Cliquez sur un atome ou une liaison de la structure souhaitée.
Fragment ou structure	Faîtes glisser le curseur sur la structure ou le fragment à sélectionner (vous pouvez auparavant régler le mode de sélection Lasso ou Rectangular ; voir la Section 3.6.4).
Plusieurs structures, fragments	Faîtes glisser le curseur sur la structure ou le fragment à sélectionner en maintenant la touche SHIFT enfoncée (vous pouvez auparavant régler le mode de sélection Lasso ou Rectangular ; voir la Section 3.6.4).
Structure entière	Cliquez dans un espace vide dans la zone de dessin adjacente à, mais sans contact avec, la structure à sélectionner.
Toutes les structures dans l'espace de travail	Cliquez une fois dans un espace vide de la zone de dessin éloigné des structures dessinées jusqu'à ce que toutes les structures soient sélectionnées et marquées de carrés creux. Un clic supplémentaire désélectionne toutes les structures.
Objets dessinés dans le mode Dessin	Cliquez une fois sur l'objet.
Tous les objets dans l'espace de travail	Appuyez sur CTRL + A

Tableau 2. Le tableau suivant résume les actions à effectuer pour déplacer un objet (notez que l'outil **Sélectionner/Déplacer** doit être activé ):

Pour déplacer	Procédure
Un objet sélectionné sans alignement quadrillage	Si Snap On Grid n'est pas sélectionné dans le menu Options (voir la Section 3.14.3), pointez sur l'objet pour que le contour apparaisse autour de lui (pour les graphiques) ou pour que les carrés de sélection creux deviennent noirs (pour les structures) et faites glisser. Si Snap On Grid est sélectionné, maintenez les touches SHIFT + CTRL enfoncées pendant le déplacement.
Un objet sélectionné en laissant une copie derrière lui	Pointez sur l'objet pour que le contour apparaisse autour de lui (pour les graphiques) ou pour que les carrés de sélection creux deviennent noirs (pour les structures) et maintenez la touche CTRL enfoncée en faisant glisser.
Un objet sélectionné en contraignant les coordonnées de l'objet le long de l'un de ses axes	Pour déplacer l'objet sélectionné exactement le long de l'axe X (Y) sans changer les coordonnées le long de l'axe Y (X), maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le déplacement.
Un objet sélectionné avec alignement quadrillage	Si Snap On Grid n'est pas sélectionné dans le menu Options , maintenez les touches SHIFT + CTRL enfoncées pendant le déplacement. si l'option Snap On Grid est activée, faites simplement glisser l'objet.

Note Si la case **Informative Cursor** de l'onglet **Général** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, les nouvelles coordonnées de l'objet (par rapport à son emplacement d'origine) sont affichées près du curseur.

Si vous double-cliquez sur le fragment structurel sélectionné ou sur la structure entière alors que cet outil est activé, le panneau **Propriétés** (pour plus d'informations sur les options disponibles dans ce panneau, voir la Section 3.12.1) apparaît. Dans ce panneau vous pouvez modifier le style de l'objet sélectionné.

3.6.2 Bouton Sélectionner/Pivoter/Redimensionner

Ce bouton  active l'outil **Select/Rotate/Resize** qui permet de sélectionner, déplacer, et redimensionner des atomes, des liaisons, des fragments, des structures et des objets graphiques. Notez que cet outil influe sur la taille réelle de l'objet; pour changer la taille d'affichage de l'objet, utilisez les outils de zoom (voir les Sections 3.5.2-3.5.4).

Note Pour pouvoir manipuler des objets créés dans le mode Dessin, ainsi que des « plus » et des flèches de réaction, assurez vous que la case **Select Graphics** est sélectionnée dans l'onglet **Structure** de la boîte de dialogue **Préférences**. Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, reportez-vous à la Section 3.14.1.2.

Les procédures possibles pour la sélection des objets souhaités de la page ChemSketch sont décrites dans le **Tableau 1** de la section précédente.

Tableau 3. Le tableau suivant résume la procédure à suivre pour faire pivoter des objets :

Pour faire pivoter	Procédure
Un objet non sélectionné	Faites glisser l'objet (il pivotera autour de son centre).
Un objet sélectionné, autour de son centre	Pointez sur l'objet pour que le curseur devienne  et faites glisser (l'objet pivotera autour de son centre). Avant la rotation, assurez-vous que le centre d'action de l'objet est correctement placé. Pour visualiser le centre d'action d'un objet, sélectionnez Action Center sous Show dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure).
Un objet sélectionné, autour d'un point spécifique	1. Sélectionnez Action Center , sous Show , dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure). 2. Définissez le centre de rotation, soit en faisant glisser le centre d'action  vers l'emplacement souhaité, soit par CTRL + clic sur l'emplacement souhaité (le centre d'action y est placé automatiquement dans ce cas). 3. Pointez sur l'objet pour que le curseur devienne  et faites glisser.
Un objet sélectionné dans des incréments de 15 degrés	Maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant la rotation. L'objet sélectionné pivotera selon le multiple d'angle de 15° souhaité autour de son centre d'action.
Note	Pour visualiser l'angle de rotation affiché par le curseur, sélectionnez la case Informative Cursor dans l'onglet Général de la boîte de dialogue Préférences .

Tableau 4. Le tableau suivant résume la procédure à suivre pour redimensionner des objets :

Pour redimensionner	Procédure
Un objet sélectionné par rapport à l'un de ses côtés ou de ses coins	1. Désélectionnez Action Center , sous Show , dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure). 2. Pointez sur la poignée de sélection souhaitée pour que le curseur devienne une flèche à double sens ( ,  ,  , ou ) et faites glisser. Faire glisser les poignées de sélection supérieure/inférieure redimensionne la hauteur de l'objet ; faire glisser les poignées gauche/droite redimensionne la largeur ; et faire glisser les poignées de coin redimensionne l'objet proportionnellement dans toutes les directions.
Un objet sélectionné par rapport à un point spécifique	1. Sélectionnez Action Center , sous Show , dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure). 2. Définissez le centre de redimensionnement, soit en faisant glisser le centre d'action  de l'objet sélectionné vers l'emplacement souhaité, soit par CTRL + clic sur l'emplacement souhaité. 3. Pointez sur la poignée de sélection souhaitée pour que le curseur

Pour redimensionner	Procédure
	devienne une flèche à double sens ( ,  ,  , ou ) et faites glisser. Faire glisser les poignées de sélection supérieure/inférieure redimensionne la hauteur de l'objet ; faire glisser les poignées gauche/droite redimensionne la largeur ; et faire glisser les poignées de coin redimensionne l'objet proportionnellement dans toutes les directions.
Un objet sélectionné par rapport à son centre	Maintenez la touche CTRL enfoncée pendant que vous faites glisser une poignée de sélection de la manière décrite ci-dessus.
Un objet sélectionné, dans une certaine proportion	Maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant que vous faites glisser une poignée de sélection latérale de la manière décrite ci-dessus. L'objet sélectionné sera redimensionné dans des proportions multiples de 5.
Un objet sélectionné pour que la hauteur et la largeur changent de manière indépendante	Maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant que vous faites glisser une poignée de sélection de coin de la manière décrite ci-dessus.

Note Pour visualiser le pourcentage de redimensionnement affiché par le curseur, sélectionnez la case **Informative Cursor** dans l'onglet **Général** de la boîte de dialogue **Préférences**.

Vous pouvez passer rapidement de cet outil à l'outil **Sélectionner/Déplacer**  par un clic droit dans l'espace de travail.

3.6.3 Bouton Rotation 3D

Ce bouton  active l'outil **Rotation 3D** qui permet de faire pivoter des structures ou des fragments sélectionnés en trois dimensions. Cliquez sur **Rotation 3D**  et pointez sur un atome ou une liaison pour qu'il soit entouré par un rectangle, puis faites glisser.

Notez que la direction de rotation des atomes de premier plan dans la structure optimisée 3D correspond au mouvement du curseur. En d'autres termes, faire glisser vers la droite déplace les atomes de premier plan vers la droite.

Si vous utilisez les liaisons stéréochimiques avant et arrière pour la définition de la direction des liaisons, vous devriez le faire sur la structure « plate » non optimisée 3D, puis démarrer à nouveau l'optimisation 3D.

Astuce Vous pouvez désigner n'importe quelle liaison comme axe de rotation 3D en cliquant dessus tout en maintenant la touche CTRL enfoncée. La liaison sera marquée en rouge. Pour annuler, cliquez à nouveau sur la liaison en maintenant la touche CTRL enfoncée.

Vous pouvez passer rapidement de cet outil à l'outil **Sélectionner/Déplacer**  par un clic droit dans l'espace de travail.

3.6.4 Bouton Activer/Désactiver lasso

Ces boutons  /  contrôle le mode utilisé pour la sélection des structures. Il y a deux modes de sélection. Le premier mode () sélectionne les objets avec la case de sélection rectangulaire, alors que le second mode sélectionne les objets avec le trait sélectif en lasso (). Notez que le second mode, le lasso, permet de sélectionner des objets de manière plus spécifique et plus précise. Pour choisir l'un des deux modes, cliquez sur le bouton. Pour sélectionner l'objet souhaité sur l'écran, glissez dessus.

Note Dans la plupart des cas, un clic sur le bouton **Lasso Activé/Désactivé** active automatiquement l'outil **Sélectionner/Déplacer** .

3.6.5 Bouton Dessin Normal

Ce bouton  active l'outil **Dessin Normal** qui permet de dessiner des liaisons chimiques dans le mode normal où, au contraire de l'outil **Dessin Continu** , vous pouvez dessiner de nouvelles liaisons chimiques dans ou à partir de n'importe quel atome sur l'écran en cliquant sur l'atome désiré ou en effectuant un glissé à partir de lui. Notez que l'outil **Dessin Normal** est automatiquement activé lorsque ChemSketch est chargé.

Note Vous pouvez passer rapidement des outils **Dessin Normal** à **Dessin Continu** et inversement par un clic droit dans l'espace de travail.

Le tableau suivant résume les actions possibles avec cet outil :

Action	Effet
Cliquer dans l'espace de travail.	Dessine un atome actuellement sélectionné dans la barre d'outils Atomes.
Cliquer sur un atome séparé du même type que l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Dessine une liaison simple avec la longueur par défaut.
Cliquer sur un atome lié du même type que l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Dessine une liaison simple à un angle de 120 degrés par rapport à la liaison existante.
CTRL + Clic sur un atome lié du même type que l'atome sélectionné.	Dessine une liaison simple à un angle de 180 degrés par rapport à la liaison existante.
Cliquer sur un atome d'un type différent de l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Remplace le type d'atome par celui de l'atome sélectionné. Notez que vous pouvez dessiner une liaison avec un atome du type sélectionné à l'extrémité en activant l'outil Dessin Continu  (pour plus d'informations, voir la section suivante).
Cliquer sur une liaison. Faire glisser.	Passé d'un type de liaison possible à un autre (simple/double/triple). Dessine une liaison simple à n'importe quel angle et de n'importe quelle longueur. Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences , vous pouvez dessiner des liaisons d'une longueur multiple de la valeur spécifiée et à un angle multiple de 15 degrés. Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin est contraint par le quadrillage.
SHIFT + glissé.	Dessine une liaison simple d'une longueur multiple de la valeur spécifiée dans la zone Fixed de la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure) et à un angle multiple de 15 degrés. Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences , vous pourrez dessiner des liaisons de n'importe quel angle et n'importe quelle longueur.
SHIFT + CTRL + glissé.	Dessine une liaison simple selon le quadrillage. Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin n'est pas contraint par le quadrillage.
Clic droit dans un espace vide.	Passé à l'outil Dessin Continu  .

3.6.6 Bouton Dessin Continu

Ce bouton  active l'outil **Dessin Continu** qui permet de dessiner des liaisons chimiques dans le mode continu où, contrairement à l'outil **Dessin Normal** , de nouvelles liaisons chimiques ne peuvent être dessinées qu'à partir d'un atome spécifique sélectionné (placé dans le carré noir). Si aucun atome n'est sélectionné, cliquez sur un atome pour le sélectionner ou cliquez dans un espace de travail vide pour insérer un nouvel atome. Notez qu'un seul atome à la fois peut être sélectionné sur l'écran.

Note Vous pouvez passer des outils **Dessin Normal** à **Dessin Continu** et inversement par un clic droit de la souris dans l'espace de travail.

Le tableau suivant résume les actions possibles avec cet outil :

Action	Effet
Cliquer dans l'espace de travail.	Dessine un atome actuellement sélectionné dans la barre d'outils Atomes et l'affiche en surbrillance.
Cliquer sur un atome existant du même type que l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Affiche l'atome en surbrillance.
Clics répétitifs sur le même atome.	Dessine une liaison simple avec la longueur par défaut connectée à l'atome du même type.
Clics répétitifs sur un autre atome.	Connecte les deux atomes.
Clics répétitifs dans l'espace de travail.	Dessine des atomes de même type connectés par des liaisons simples.
Cliquer sur un atome d'un type différent de l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Affiche l'atome existant en surbrillance.
Cliquer sur ce même atome en surbrillance pour la <i>deuxième fois</i> .	Dessine une liaison simple avec la longueur par défaut à partir de l'atome en surbrillance, et place l'atome du type sélectionné à l'extrémité de cette liaison.
Cliquer sur un autre atome pour la <i>deuxième fois</i> .	Connecte les deux atomes par une liaison simple.
Clics répétitifs dans l'espace de travail.	Dessine des atomes du type sélectionné dans la barre d'outils Atomes et les connecte par des liaisons simples.
Double Clic sur un atome lié.	Dessine une liaison simple connectant un atome du type sélectionné à un angle de 120° par rapport à la liaison existante.
CTRL + double clic sur un atome lié.	Dessine une liaison simple connectant un atome du type sélectionné à un angle de 180° par rapport à la liaison existante.
Cliquer sur une liaison .	Passes d'un type de liaison possible à un autre (simple/double/triple).
Faire glisser .	Dessine une liaison simple à n'importe quel angle et de n'importe quelle longueur. Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences , vous pouvez dessiner des liaisons d'une longueur multiple de la valeur spécifiée et à un angle multiple de 15 degrés. Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin est contraint par le quadrillage.
SHIFT + glissé .	Dessine une liaison simple d'une longueur multiple de la valeur spécifiée dans la zone Fixed de la boîte de dialogue Préférences (onglet Structure) et à un angle multiple de 15 degrés. Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences , vous pourrez dessiner des liaisons de n'importe quel angle et n'importe quelle longueur.
SHIFT + CTRL + glissé .	Dessine une liaison simple selon le quadrillage. Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin n'est pas contraint par le quadrillage.
Clic droit dans un espace vide.	Passes à l'outil Dessin Normal 

3.6.7 Bouton Dessin de chaînes

Ce bouton  active l'outil **Dessin de Chaînes** qui permet de dessiner des chaînes d'atomes. Pour dessiner une longue chaîne atomique, faites un glissé sur l'espace de travail avec cet outil activé.

Note Pour visualiser le nombre d'éléments de chaîne affiché par le curseur pendant le glissé avec cet outil, sélectionnez la case **Informative Cursor** dans l'onglet **Général** de la boîte de dialogue **Préférences**.

Le tableau suivant résume les actions possibles avec cet outil :

Action	Effet
Cliquer dans l'espace vide.	Dessine un atome actuellement sélectionné dans la barre d'outils Atomes.
Cliquer sur un atome simple du même type que l'atome sélectionné dans la barre d'outils Atomes.	Dessine une liaison simple avec la longueur par défaut.
Cliquer sur un atome lié du même type que l'atome sélectionné.	Dessine une liaison simple à un angle de 120° par rapport à la liaison existante.
CTRL + clic sur un atome lié du même type que l'atome sélectionné.	Dessine une liaison simple à un angle de 180° par rapport à la liaison existante.
Cliquer sur un atome d'un type différent de l'atome sélectionné.	Remplace le type d'atome par celui de l'atome sélectionné.
Cliquer sur une liaison . Faire glisser	<p>Passes d'un type de liaison possible à un autre (simple/double/triple).</p> <p>Dessine une chaîne. Les atomes de cette chaîne sont connectés à un angle de 120° les uns par rapport aux autres.</p> <p>Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences, vous pourrez dessiner des liaisons d'une longueur multiple de la valeur spécifiée et à un angle multiple de 15 degrés.</p> <p>Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin est contraint par le quadrillage.</p>
CTRL + glissé	<p>Dessine une chaîne. Les atomes de la chaîne sont connectés à un angle de 180° les uns par rapport aux autres.</p> <p>Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences, vous pourrez dessiner des liaisons d'une longueur multiple de la valeur spécifiée et à un angle multiple de 15 degrés.</p> <p>Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin est contraint par le quadrillage.</p>
SHIFT + glissé.	<p>Dessine une chaîne de longueur fixe et d'angle fixe de 15 degrés.</p> <p>Si les cases Fixed Bond Angle et Bond Length sont sélectionnées dans l'onglet Structure de la boîte de dialogue Préférences, vous pourrez dessiner des liaisons de n'importe quel angle et n'importe quelle longueur.</p>
SHIFT + CTRL + glissé.	<p>Dessine une chaîne selon le quadrillage.</p> <p>Si Snap on Grid dans le menu Options est sélectionné, le dessin n'est pas contraint par le quadrillage.</p>
Appuyer sur TAB pendant le glissé	Retourne la chaîne dessinée.
Clic droit dans un espace vide.	<p>Passes à l'outil Dessin Normal .</p>

3.6.8 Bouton Liaisons stéréo avant

Ce bouton  active l'outil **Liaisons Stéréo Avant** qui permet de dessiner des liaisons stéréochimiques orientées vers l'utilisateur dans une représentation tridimensionnelle de la structure dessinée. Lorsque cet outil est activé, de nouvelles liaisons chimiques peuvent être dessinées de la même manière qu'avec

l'outil **Dessin Normal**  (pour plus d'informations, voir la section 3.6.5). Les différences entre ces outils sont les suivantes :

- Lorsqu'une nouvelle liaison est placée entre deux atomes ou générée à partir d'un atome, elle est orientée vers l'utilisateur.
- Cliquer sur la même liaison plusieurs fois ne change pas son ordre (c'est à dire que vous ne pouvez pas dessiner des liaisons double ou triple avec cet outil), mais la direction de la liaison.

Pour modifier une liaison normale, une liaison stéréo arrière (une liaison vue de l'arrière) ou une liaison dative en une liaison orientée vers l'utilisateur, activez cet outil et cliquez sur la liaison.

Vous pouvez passer de l'outil **Liaisons Stéréo Avant** à **Liaisons Stéréo Arrière** et inversement en cliquant sur le bouton droit de la souris dans l'espace de travail.

3.6.9 Bouton Liaisons stéréo arrière

Ce bouton  active l'outil **Liaisons Stéréo Arrière** qui permet de dessiner des liaisons stéréochimiques vues de l'arrière dans une représentation tridimensionnelle de la structure dessinée. Lorsque cet outil est activé, de nouvelles liaisons chimiques peuvent être dessinées de la même manière qu'avec l'outil **Dessin**

Normal , mais il y a des différences entre ces outils:

- Lorsqu'une nouvelle liaison est placée entre deux atomes ou générée à partir d'un atome, elle est orientée vers l'arrière.
- Cliquer sur la même liaison plusieurs fois ne change pas son ordre (c'est à dire que vous ne pouvez pas dessiner des liaisons double ou triple avec cet outil), mais la direction de la liaison. Notez que vous ne pouvez pas dessiner de liaisons doubles ou triples dans ce mode.

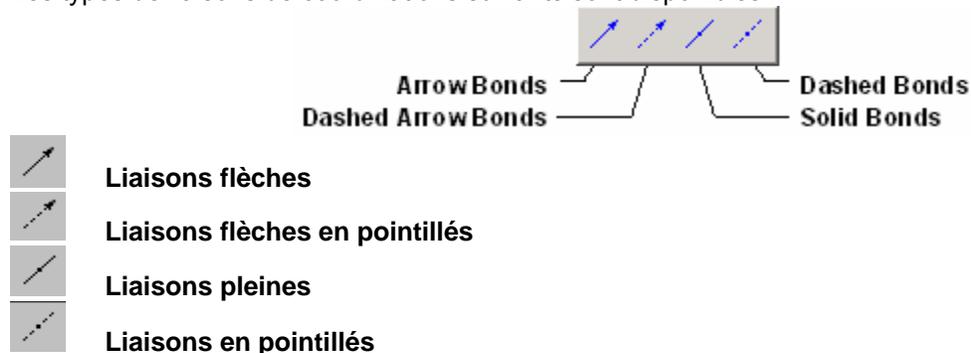
Pour modifier une liaison normale, une liaison stéréo avant ou une liaison dative en une liaison vue de l'arrière, activez cet outil et cliquez sur la liaison.

Vous pouvez passer de l'outil **Liaisons Stéréo Arrière** à **Liaisons Stéréo Avant** et inversement en cliquant sur le bouton droit de la souris dans l'espace de travail.

3.14.10 Boutons liaisons de coordination

Ces boutons permettent de dessiner des liaisons de coordination (non covalentes). Pour afficher tous les types possibles, cliquez sur le triangle en bas à droite de ce bouton.

Les types de liaisons de coordinations suivants sont disponibles :



En activant l'une des liaisons de coordination, de nouvelles liaisons chimiques peuvent être dessinées de la même manière qu'avec l'outil **Dessin Normal** , mais il y a plusieurs différences entre ces outils :

- Lorsqu'une nouvelle liaison est placée entre deux atomes ou générée à partir d'un atome, c'est une liaison de coordination.
- Cliquer sur une liaison de coordination ne change pas son ordre (c'est à dire que vous ne pouvez pas dessiner des liaisons double ou triple avec cet outil), mais la direction de la liaison.

Pour transformer une liaison covalente, une liaison stéréo avant ou une liaison arrière en une liaison de coordination, activez l'outil **Liaison de Coordination** souhaité en cliquant sur le bouton correspondant, puis cliquez sur la liaison.

Note Le nombre de liaisons de coordination dessinées sur un atome donné n'affecte pas sa valence ou sa charge. Le nombre maximum de liaisons de coordination sur un atome est défini par son nombre d'électrons, qui est fixé par défaut à 6 pour les non métalliques, et à 4, 6, 8 ou 10 pour les métalliques.

Vous pouvez rapidement basculer vers l'outil **Dessin Normal** en cliquant sur le bouton droit de la souris dans l'espace de travail.

3.6.11 Boutons liaison spéciale

Ces boutons  permettent de dessiner différents types de liaisons. Pour afficher tous les types possibles, cliquez sur le triangle en bas à droite de ce bouton.

Les types suivants sont disponibles :

	Liaisons stéréo non définies
	Liaisons stéréo doubles non définies
	Liaisons délocalisées
	Liaisons doubles avec ordre partiel
	Liaisons creuses
	Liaisons quadruples

Dans la version 10.0, un nouveau type de liaison (double semi gras) a été ajouté.

En activant l'une des liaisons spéciales, de nouvelles liaisons chimiques peuvent être dessinées de la même manière qu'avec l'outil **Dessin Normal**. Les différences entre ces outils sont les suivantes :

- Lorsqu'une nouvelle liaison est placée entre deux atomes ou générée à partir d'un atome, c'est une liaison spéciale (non définie).
- Cliquer sur une liaison non définie ne change pas son ordre (c'est à dire que vous ne pouvez pas dessiner des liaisons double ou triple avec cet outil).

Pour modifier une liaison covalente, une liaison stéréo avant ou une liaison arrière en une liaison non définie, activez l'outil **Liaisons Spéciales** souhaité en cliquant sur le bouton correspondant, puis cliquez sur la liaison.

Vous pouvez rapidement passer de cet outil à l'outil **Dessin Normal** en cliquant sur le bouton droit de la souris dans l'espace de travail.

3.6.12 Bouton courbe de délocalisation pleine/en pointillés

Cette série de boutons  permet de dessiner des courbes pleines ou en pointillés indiquant les liaisons chimiques délocalisées.

Cliquer sur le triangle en bas à droite du bouton affiche les boutons suivants :



Courbe de délocalisation pleine



Courbe de délocalisation en pointillés

Pour insérer la courbe de délocalisation, dessinez la structure ou sélectionnez le fragment (ou la structure) dans lequel vous voulez insérer une courbe, et cliquez sur l'un de ces boutons. La courbe va apparaître automatiquement.

Important Pour appliquer cette option, le fragment sélectionné doit contenir au moins deux liaisons et aucune branche. Dans le cas contraire, le message d'avertissement correspondant apparaît. Notez que les liaisons d'interrogation, triple, et quadruple ne peuvent être délocalisées.

Après avoir appliqué cette option, le centre d'action, qui n'est pas visible à l'impression, s'affiche. Vous pouvez le placer où vous le souhaitez en le faisant glisser.

Il est possible de faire glisser un atome ou une liaison dans le fragment sélectionné dans l'espace de travail. Vous pouvez dessiner n'importe quelle nouvelle liaison à partir du centre en cliquant et en faisant glisser.

Si nécessaire, vous pouvez modifier un atome dans le fragment sélectionné, sans supprimer la courbe. Pour supprimer la courbe de délocalisation, sélectionnez le centre d'action en cliquant dessus, et appuyer sur DELETE. La courbe sera également supprimée si vous changez le type de liaison dans la structure.

Les charges ou particules radicalaires présentes dans la structure seront placées dans le centre d'action si vous cliquez sur l'un de ces boutons . Notez que vous pouvez également régler une charge ou une particule radicalaire dans le centre d'action manuellement; dans la barre d'outils Atomes, cliquez sur le bouton **Particules de Charge/Radicalaires** souhaité (voir la Section 3.7.6), puis cliquez sur le centre d'action.

3.14.13 Boutons Liaison de Markush

Ces boutons activent les outils qui permettent d'attacher une liaison de Markush à une structure ou à un fragment de structure sélectionné. La structure résultante est générique (elle représente un groupe de structures correspondantes) où la liaison de Markush indique la variabilité de la position d'un substituant dans la structure.

Cliquer sur le triangle en bas à droite de ce bouton affiche les boutons suivants :



Liaison de Markush



Liaison de Markush avec ombre



Fragment ajouté ou supprimé



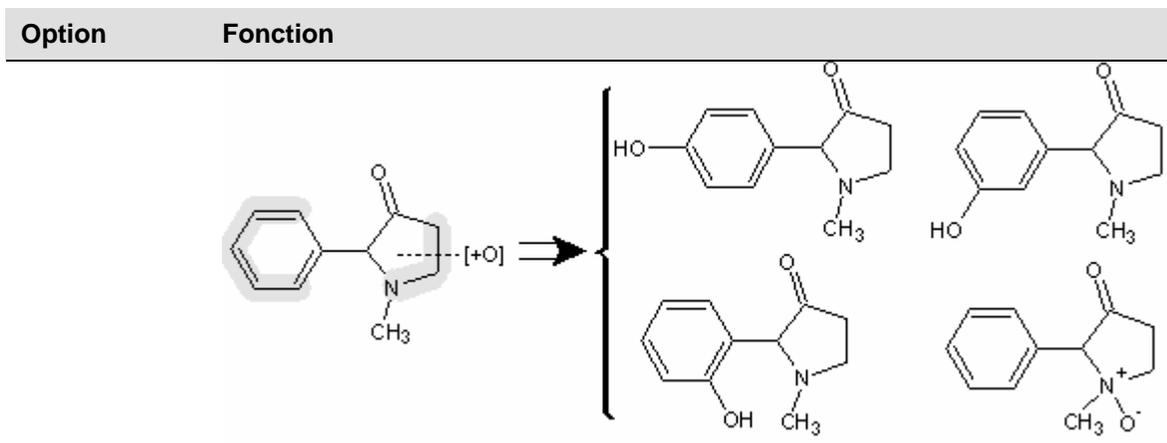
Fragment ajouté ou supprimé avec ombre

Pour attacher une liaison de Markush, cliquez sur l'atome désiré dans la barre d'outils Atomes ou sélectionnez-le dans la Table Périodique (cet atome sera à l'extrémité de la liaison de Markush), sélectionnez la structure souhaitée dans l'espace de travail (s'il y a plus d'une structure dessinée), et cliquez sur l'un des boutons **Liaison de Markush**. Si rien n'est sélectionné dans la structure et que vous cliquez sur le bouton, un message d'avertissement apparaît, demandant si vous souhaitez attacher la liaison de Markush à la structure entière.

Pour afficher clairement les atomes auxquels renvoie une liaison de Markush, utilisez l'outil **Liaison de Markush avec ombre**. Pour dessiner les structures avec les valeurs de masse ou la différence de formule attachées, à la place des fragments de structure ajoutés ou supprimés eux-mêmes, cliquez sur **Fragment Ajouté ou Supprimé**  ou **Fragment Ajouté ou Supprimé avec Ombre** . La boîte de dialogue **Définir Différence de Masse Markush** apparaît.

Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Fonction
Addition / Soustraction	Dans cette zone, choisissez de noter la valeur de différence comme ajoutée (Addition) ou soustraite (Subtraction).
Masse	<p>Sélectionnez cette option pour attacher la valeur de différence de masse en tant qu'étiquette de Markush.</p> <p>Par exemple, pour décrire une transformation de N,N-diméthyl-4-nitrosoaniline ayant donné lieu à un produit dont le poids de formule est inférieur de 14 unités à celui de l'initial, sélectionnez les options Soustraction et Masse, puis, dans la case adjacente, saisissez 14. La structure créée suivante représente la suppression de l'atome d'oxygène du groupe azote, ou monodéméthylation:</p> <div style="text-align: center;"> </div> <p>Les deux structures ont des poids de formules inférieurs de 14 unités par rapport à N,N-diméthyl-4-nitrosoaniline initial.</p>
Fragment	<p>Permet d'attacher la différence de formule en tant qu'étiquette de Markush; sélectionnez cette option, puis, dans la case adjacente, saisissez la différence de formule nécessaire.</p> <p>Par exemple, la structure Markush suivante avec le fragment d'oxygène ajouté représente au moins trois produits d'hydroxylation et d'oxyde aminé à la fois:</p>



Note Si vous souhaitez lancer une recherche substructure de molécules à liaison de Markush, veuillez à choisir des atomes dont vous souhaitez qu'ils fassent partie de la liaison de Markush.

3.6.14 Bouton Plus de Réaction

Ce bouton  active l'outil **Plus de Réaction** permettant de dessiner un plus de réaction dans le mode Structure.

Sélectionnez cet outil, déplacez le curseur à l'emplacement où vous souhaitez insérer un plus, et cliquez une fois. Un second clic sur le plus le supprime.

Note Vous pouvez changer la couleur et le style des plus de réaction dans l'onglet **Réaction** de la boîte de dialogue **Préférences**. Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, reportez-vous à la Section 3.14.1.3.

Pour pouvoir déplacer et faire pivoter les plus de réaction dans le mode Structure, assurez-vous que la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée.

3.6.15 Bouton Flèche de réaction

Ces boutons activent la série d'outils permettant de dessiner diverses flèches de réaction dans le mode Structure. Cliquez sur le triangle en bas à droite de ce bouton pour l'élargir et afficher des boutons **Flèche de Réactions** supplémentaires :



Pour insérer une flèche, choisissez l'outil **Flèche** souhaité et cliquez dans l'espace de travail pour placer une flèche de longueur standard, ou faites un glissé pour dessiner une flèche de la longueur souhaitée. Un second clic sur la flèche la supprime.

Note Vous pouvez changer la couleur et le style des flèches de réaction dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Réaction**). Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, reportez-vous à la Section 3.4.1.3.

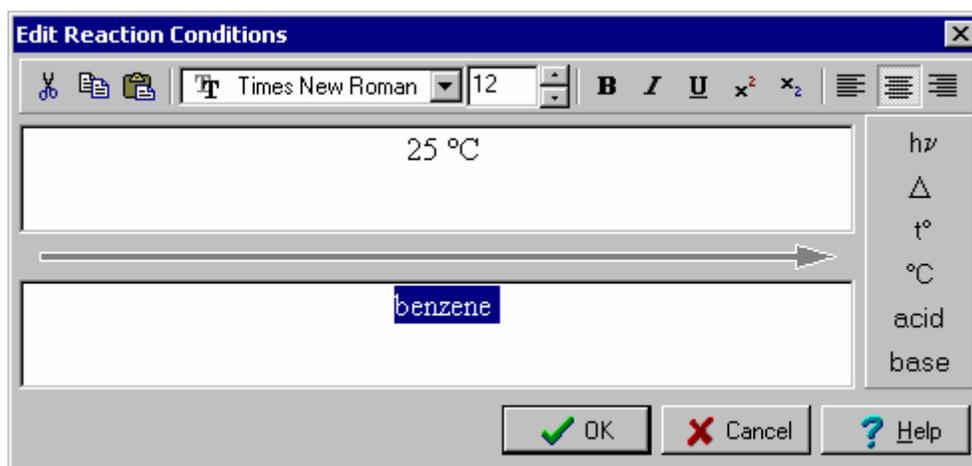
Pour pouvoir déplacer et faire pivoter les flèches de réaction, assurez-vous que la case **Select Graphics** est sélectionnée dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**).

Vous pouvez passer d'un outil de flèche de réaction disponible à un autre en effectuant un clic droit dans l'espace de travail.

3.6.16 Bouton Etiquetage de flèche de réaction

Le bouton  active l'outil qui permet d'insérer des étiquettes qui précisent les conditions de réaction appropriées.

Pour insérer des conditions de réaction, activez cet outil et cliquez sur la flèche de réaction. Dans la boîte de dialogue **Editer Conditions de Réaction** qui apparaît, entrez vos propres commentaires ou cliquez sur plusieurs boutons de la série de conditions sur le côté droit de la boîte de dialogue. Cliquez sur **OK**.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Fonction
	Coupe le texte sélectionné et le place dans le presse-papier.
	Copie la sélection dans le presse-papier.
	Insère le contenu du presse-papier au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, en remplacement de l'extrait sélectionné.
	Vous pouvez dans cette case choisir le style de police approprié.
	Vous pouvez dans cette case choisir la taille de police.
	Applique le format gras au texte sélectionné. Cliquez une seconde fois pour annuler le formatage gras.
	Applique le format italique au texte sélectionné. Cliquez une seconde fois pour annuler le formatage italique.
	Souligne le texte sélectionné. Cliquez une seconde fois pour annuler le formatage souligné.
	Formate le texte sélectionné en exposant. Le bouton Exposant est automatiquement activé lorsque vous entrez une formule dans l'un des cadres. Par exemple, la charge d'un atome est automatiquement mise en exposant.

Option	Fonction
	Formate le texte sélectionné en indice. Le bouton Indice est automatiquement activé lorsque vous entrez une formule dans l'un des cadres. Par exemple, l'indice de numéro atomique est automatiquement mis en indice.
	Aligne le texte à gauche.
	Centre le texte.
	Aligne le texte à droite.
Upper Pane	Vous pouvez dans ce cadre spécifier les conditions de réaction; les conditions seront placées au-dessus de la flèche de réaction.
Lower Pane	Cliquez sur le cadre inférieur puis entrez ou sélectionnez des conditions spécifiques de réaction pour les placer sous la flèche de réaction.
	Insère le symbole hν (éclairage) au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.
	Insère le symbole Δ (chaleur appliquée) au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.
	Insère le symbole t° (chaleur appliquée) au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.
	Insère le symbole $^\circ\text{C}$ au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.
	Insère l' acide comme condition de réaction au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.
	Insère la base comme condition de réaction au point d'insertion ou, si un extrait est sélectionné, le remplace.

Note Si vous exportez les Conditions de Réaction définies avec l'outil **Etiquetage de Flèche de Réaction** vers un fichier .RXN, les conditions préalablement spécifiées seront perdues.

3.6.17 Boutons Calculateur de Réaction

Ce bouton  active l'outil permettant le calcul automatique de données de synthèse pour chaque composé de réaction.

Pour calculer des données, activez cet outil et cliquez sur la flèche de réaction; La boîte de dialogue **Reaction Calculator** apparaît. Elle contient le tableau **Components** avec les colonnes suivantes : formule moléculaire et poids moléculaire (ces colonnes sont remplies automatiquement), coefficient stoechiométrique (**K**), quantité (**n**), concentration (**C**), masse (**m**), volume (**V**), densité (**d**), ainsi que le rendement des produits (**Yield**).

Note Pour fournir le calcul automatique des données de réaction, les données sont divisées en deux types : indépendantes et relatives. Vous ne pouvez éditer que les données indépendantes uniquement. Les données relatives sont automatiquement calculées sur la base des données éditables et ne peuvent pas être éditées.

Components									
Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	C ₂ H ₃ ClO	78.4976	1	0.11 mol	-	8.63 g	7.85 mL	1.1 g/mL	Based on
2	C ₆ H ₆ O	94.1112	1	0.1 mol	-	9.41 g	-	-	-
3	C ₅ H ₅ N	79.0999	1	0.11 mol	-	8.7 g	8.85 mL	0.983 g/mL	-
Product									
1	C ₈ H ₈ O ₂	136.1479	1	0.0947	-	12.9 g	-	-	86.1 %
Total	-	-	-	0.32 mol	-	26.7 g	16.7 mL	-	-

Show Total

OK Cancel Help

Pour éditer les données de réaction, double-cliquez sur la cellule correspondante directement dans le tableau **Components**, puis saisissez la valeur des données. Après avoir appuyé sur ENTREE, toutes les données relatives sont automatiquement calculées. (Pour obtenir le calcul de la masse et de la quantité, vous devez saisir la valeur de la densité.)

Notez que le rendement (**Yield**) est toujours relatif, et que son calcul est basé sur le composé représentant la quantité la plus basse. Pour calculer le rendement, double-cliquez sur la cellule correspondant au produit sous **m** (masse) et saisissez la valeur correspondante, puis appuyer sur ENTREE. Vous pourrez voir le rendement calculé, et la notation « Based on » apparaîtra sous **Yield** dans la ligne correspondant au réactant avec la quantité la plus basse.

Pour afficher la quantité résumée des réactants, sélectionnez la case **Show Total** sous le tableau **Components**.

Un clic sur **OK** ferme la boîte de dialogue **Reaction Calculator** et colle le tableau **Components** complété dans la page ChemSketch.

3.6.18 Bouton Mappe Atome-Atome

Ce bouton  active l'outil **Mapping** qui permet de schématiser une réaction dessinée manuellement ou automatiquement. En cliquant sur le bouton, le panneau **Map Tools** apparaît et le mode **mapping** est activé.

Le panneau **Map Tools** contient les boutons suivants :

Bouton	Fonction
Mappage manuel 	Active le mode Manual Mapping (notez que ce mode est défini par défaut). Vous pouvez maintenant attribuer manuellement des atomes du réactant aux atomes du produit correspondants en pointant sur un atome choisi et en le faisant glisser vers son homologue.
Sélectionner une Réaction 	Cet outil fonctionne de la même façon que l'outil Sélectionner/Déplacer (pour plus d'informations sur cet outil, voir la section 3.6.1) excepté le fait qu'il ne vous permet pas de déplacer des objets.
Mappage automatique 	Cliquez sur ce bouton pour effectuer le mappage automatique de votre réaction. Notez que vous pouvez utiliser cet outil pour effectuer le mappage d'une seule réaction à la fois. Si il y a plus d'une réaction dans l'espace de travail, vous devez en sélectionner une en utilisant l'outil

Bouton	Fonction
	Select Reaction.
Supprimer le mappage 	Annule le mappage de toutes les réactions sur la page en cours. Pour supprimer le mappage d'une réaction en particulier, sélectionnez d'abord la réaction désirée en utilisant l'outil Sélectionner Réaction , puis cliquez sur ce bouton.

Il est possible d'effectuer à la fois un mappage manuel et automatique sur la même réaction.

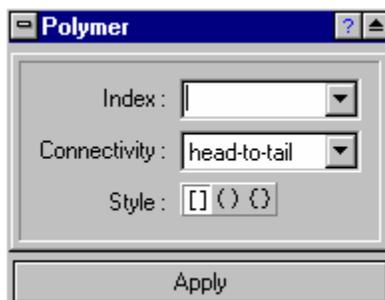
Pour distinguer les nombres générés automatiquement des nombres insérés manuellement, sélectionnez des couleurs différentes pour les mappages automatique et manuelle. Pour définir la couleur des numéros de mappe en insertion manuelle, choisissez la couleur appropriée dans la case **Manual Mapping Color** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Réaction**). Pour un mappage automatique, choisissez la couleur appropriée dans la case **Auto/Manual Numbering Color** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**).

En fermant le panneau **Map Tools**, vous quittez le mode mappe et les numéros des atomes ne sont plus visibles.

Astuce Vous pouvez exporter les réactions schématisées vers ACD/ChemFolder (en tant que fichier REACCS.RXN) ou vers ISIS/Draw (en tant que fichiers ISIS/Sketch.SKC).

3.6.19 Boutons Polymères

Ce bouton  active l'outil **Polymères** permettant de transformer une structure ou un fragment en polymère. En cliquant sur ce bouton le panneau **Polymère** apparaît, et vous pouvez y spécifier les options souhaitées.



Ce panneau contient les options suivantes :

Option	Description
Index	Dans cette case, spécifiez l'indice de votre polymère (un nombre ou une lettre). Quand vous cliquez sur Apply il apparaîtra dans le coin inférieur droit du crochet droit.
Connectivity	Dans cette case, choisissez la manière dont les unités sont connectées dans votre polymère: tête-à-queue , tête-à-tête , ou l'un ou l'autre/inconnu . Le réglage par défaut est tête-à-queue; ainsi, le coin supérieur droit du crochet droit est vide, tandis que les types tête-à-tête , ou l'un ou l'autre/inconnu produisent 'hh' et 'eu' respectivement.
Style	Choisissez l'apparence de votre polymère: entre crochets [], entre parenthèses (), ou entre accolades { }.
Apply	Applique les paramètres définis au polymère sélectionné.

Pour dessiner un polymère, suivez les étapes suivantes :

1. Dessinez une ou plusieurs structures que vous voulez convertir en polymère.
2. Dans la barre d'outils Structure, cliquez sur **Polymères**  et, dans le panneau **Polymères** qui apparaît, spécifiez les paramètres souhaités.

3. Sélectionnez la zone que vous voulez transformer en polymère par un clic ou en effectuant un glissé. Notez que vous pouvez transformer la structure entière ou des parties de deux structures en un seul et unique polymère en utilisant le glissé.

Dès que la zone est sélectionnée, le polymère apparaît dans l'espace de travail.

Astuce En dessinant des polymères, et uniquement dans un but pratique, utilisez CTRL + clic/glissé avec les outils **Dessin Normal** , **Dessin Continu** , ou **Dessin de Chaînes** . Chacune de ces combinaisons permet le dessin d'une liaison avec un angle de 180° par rapport à la liaison existante, plutôt que 120° (créé quand la touche CTRL n'est pas enfoncée), créant ainsi des structures plus personnalisées. Pour plus d'informations sur l'utilisation de ces combinaisons, voir les Sections 3.6.5, 3.6.6, et 3.6.7.

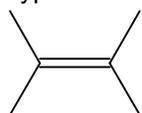
Pour créer des structures à extrémité ouverte, remplacez les atomes situés aux extrémités d'un polymère dessiné par des atomes vides en utilisant l'outil **Pseudo Atome** (voir la section 3.7.5).

3.6.20 Bouton Changer la position

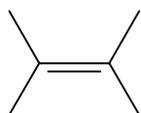
Ce bouton  active l'outil **Changer la Position** permettant de changer la disposition d'une liaison double ou la position d'affichage d'un atome d'hydrogène, de contrôler les points d'intersection des liaisons, et de spécifier le point de connexion d'une étiquette d'atome.

Vous pouvez avec cet outil effectuer les opérations suivantes :

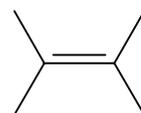
- Après avoir activé cet outil, chaque clic supplémentaire sur une **liaison double** permet de passer d'un des trois types de liaison double ci-dessous à un autre :



Symétrique

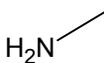


Asymétrique 1



Asymétrique 2

- Après avoir activé cet outil, chaque clic supplémentaire sur un **atome** permet de passer de l'une à l'autre des diverses positions de l'hydrogène. Un ou des hydrogènes peuvent être affichés autour du symbole de base dans quatre positions :



Gauche



Bas



Haut



Droit

- Quand les liaisons se croisent, l'une d'elles est affichée en tant que liaison d'arrière plan et l'autre en tant que liaison de premier plan. Pour amener la liaison d'arrière plan au premier plan, maintenez la touche SHIFT enfoncée et cliquez dessus avec l'outil **Change Position** activé.
- Les étiquettes d'atome insérées avec l'outil **Editer Etiquette Atome** (pour plus d'informations, voir la Section 3.7.4) peuvent être connectées à la liaison par n'importe lequel des symboles sur l'étiquette. Pour changer le symbole de connexion sur l'étiquette, maintenez la touche SHIFT enfoncée et cliquez à plusieurs reprises sur l'étiquette d'atome avec l'outil **Changer la Position** activé. L'étiquette sera ainsi modifiée et, lorsque l'atome désiré sera devenu un point de connexion, cessez de cliquer. Si vous cliquez sur l'étiquette sans maintenir la touche SHIFT enfoncée, le programme connectera la liaison au premier ou au dernier symbole de l'étiquette.

3.6.21 Bouton Placer la liaison horizontalement

Ce bouton*  active l'outil **Placer la liaison horizontalement** permettant de faire pivoter une structure chimique de sorte qu'une liaison déterminée devienne horizontale.

Pour placer la liaison souhaitée horizontalement, activez cet outil puis cliquez sur la liaison. Tandis que la liaison sélectionnée devient horizontale, la structure entière pivote conformément. Chaque clic supplémentaire sur la même liaison fait pivoter la structure de 180°.

3.6.22 Bouton Placer la liaison verticalement

Ce bouton*  active l'outil **Placer la liaison verticalement** permettant de faire pivoter une structure chimique de sorte qu'une liaison déterminée s'affiche verticalement.

Pour placer la liaison souhaitée verticalement, activez cet outil puis cliquez sur la liaison. Tandis que la liaison sélectionnée devient verticale, la structure entière pivote conformément. Chaque clic supplémentaire sur la même liaison fait pivoter la structure de 180°.

3.6.23 Bouton Pivoter autour de la liaison

Ce bouton*  active l'outil **Pivoter autour de la liaison** permettant de faire pivoter une structure chimique ou un fragment sélectionné sur l'axe d'une liaison déterminée.

Pour faire pivoter une structure sur l'axe de l'une de ses liaisons, activez cet outil puis cliquez sur la liaison souhaitée. Vous pouvez également faire pivoter une structure autour d'un fragment sélectionné.

Note L'application de cet outil à des structures optimisées 3D peut provoquer la déformation des structures. Il est donc recommandé d'utiliser de préférence l'outil de **Rotation 3D**



3.6.24 Bouton Renverser de haut en bas

Ce bouton*  active l'outil **Renverser de haut en bas** permettant de faire pivoter une ou plusieurs structures chimiques autour de l'axe horizontal.

Sélectionnez la structure que vous souhaitez faire pivoter et cliquez sur ce bouton. Si aucune structure ou fragment ne sont sélectionnés sur la page en cours, cliquer sur ce bouton retourne toutes les structures dessinées comme un unique objet. Renverser des structures à centre optique produit des énantiomères.

Note Si la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée, vous pouvez appliquer cet outil aux objets créés en mode Dessin, ainsi qu'à des plus et des flèches de réaction.

3.6.25 Bouton Renverser de gauche à droite

Ce bouton*  active l'outil **Renverser de gauche à droite** permettant de faire pivoter une ou plusieurs structures chimiques autour de l'axe vertical.

* Avant d'utiliser cette commande, vérifiez si c'est la structure chimique entière qui est sélectionnée, ou seulement une partie. Lorsque seules des parties d'une structure ont été sélectionnées, cette commande peut, en changeant les angles entre les liaisons, provoquer des changements non désirés dans la structure chimique. Si cela se produit,

cliquez sur **Annuler** .

Sélectionnez la structure que vous souhaitez faire pivoter et cliquez sur ce bouton. Si aucune structure ou fragment ne sont sélectionnés sur la page en cours, cliquer sur ce bouton retourne toutes les structures dessinées comme un unique objet. Notez que renverser des structures à centre optique produit des énantiomères.

Note Si la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée, vous pouvez appliquer cet outil aux objets créés en mode Dessin, ainsi qu'à des plus et des flèches de réaction.

3.6.26 Bouton Modèle instantané

Ce bouton  active l'outil **Modèle instantané** permettant de créer un motif à partir de n'importe quelle structure ou fragment sélectionné afin de pouvoir l'insérer n'importe où dans l'espace de travail, ou l'attacher à une structure.

Pour créer un modèle instantané, effectuez les opérations suivantes:

1. Sélectionnez un élément de structure que vous souhaitez reproduire. Notez que pour créer un modèle d'une structure entière vous n'avez pas besoin de la sélectionner.

2. Cliquez sur **Modèle Instantané** .

3. Pointez le curseur sur la structure ou les éléments de structure sélectionnés et cliquez. L'ombre de la structure ou des éléments sélectionnés devient attachée au curseur.

Note Si vous avez l'intention d'utiliser le modèle en vue de l'attacher à la structure déjà dessinée, assurez-vous que vous cliquez sur l'atome ou la liaison la plus appropriée lors de la création d'un modèle. Par exemple, si vous avez l'intention d'insérer une structure fusionnée avec une liaison spécifique, sélectionnez le modèle correspondant en cliquant sur la liaison (et non sur l'atome).

Vous pouvez renverser l'ombre du modèle en appuyant sur TAB.

4. Déplacez-la vers l'emplacement souhaité dans l'espace de travail et cliquez pour coller.

Note Lors de l'insertion du modèle suivi par un atome, si vous cliquez sur l'atome de la molécule dessinée en maintenant la touche SHIFT enfoncée, l'atome du modèle remplacera l'atome sur lequel vous cliquez (le modèle sera attaché sans liaison).

Vous pouvez utiliser le modèle autant de fois que vous le souhaitez jusqu'à ce que vous choisissiez un autre bouton dans la barre d'outils ou double cliquez dans l'espace de travail. Si vous avez à nouveau besoin de ce modèle, vous devez le créer à nouveau.

3.6.27 Bouton Calculer Paramètres du substituant

Ce bouton  peut être utilisé pour le calcul des constantes de substituants électroniques (σ) de différents types (par exemple, inductif, de résonance, méta, para, etc.). Il calcule également certaines constantes stériques (MV et MR, c'est-à-dire le volume molaire et la réfractivité molaire) et une constante hydrophobique (la constante π de Hansch) d'un fragment de votre composé. Cet outil est utile pour la corrélation de différentes propriétés qui dépendent des caractéristiques des substituants attachés à un centre de réaction constant.

Ce module doit être acheté en complément d'ACD/ChemSketch. Vous trouverez des détails supplémentaires sur les calculs sigma dans le *Guide de l'utilisateur ACD/Sigma Pro* situé dans le dossier de documentation ACD/Labs (\\DOCS\SIGMA.PDF).

3.7 Barre d'outils Atomes

La barre d'outils Atomes est affichée verticalement sur le côté gauche de l'espace de travail. Cette barre d'outils comprend des boutons qui peuvent être utilisés pour insérer rapidement les atomes des éléments correspondants dans la zone de dessin, et changer les propriétés atomiques.

Le tableau suivant répertorie les outils disponibles dans la barre d'outils et fournit une brève description de chaque outil :

Bouton	Fonction
	Affiche la Table Périodique des Eléments (voir la Section 3.13.5).
 / 	Activent les outils Atome d'interrogation/Liaison d'interrogation permettant de spécifier des options de recherche lors d'une recherche substructure (voir les Sections 3.7.1-3.7.2).
  	Utilisez ces boutons pour dessiner les atomes correspondants dans l'espace de travail (voir la Section 3.7.3).
	Active l'outil Editer Etiquette Atome qui permet d'insérer et de changer les étiquettes d'atome (voir la Section 3.7.4).
 / 	Cet outil permet d'insérer des pseudo atomes ou des étiquettes de désignation de radical (voir la Section 3.7.5).
	Active l'outil Particules de Charge/Radicalaires qui permet de changer la charge de l'atome et de dessiner des particules radicalaires (voir la Section 3.7.6).
	Cet outil permet de changer les propriétés chimiques d'un atome (voir la Section 3.7.7).
	Active l'outil Numérotation Manuelle qui permet de numéroter manuellement les atomes dans la ou les structures dessinées (voir la Section 3.7.8).

Note Pour personnaliser le contenu de la barre d'outils, faites un clic droit pour afficher le menu contextuel (pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1).

3.7.1 Boutons Atome d'interrogation

Ces boutons activent la série d'outils permettant de spécifier les atomes d'interrogation lors d'une recherche substructure. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton pour faire apparaître des boutons supplémentaires :

Bouton	Description
 N'importe quel atome	L'atome marqué peut être n'importe quel atome sauf l'hydrogène.
 N'importe quel hétéroatome	L'atome marqué peut être n'importe quel atome sauf le carbone ou l'hydrogène.
 N'importe quel atome sans hydrogène	Aucun hydrogène ne peut être attaché à cet atome.
 Atome de la liste	Crée une liste d'atomes à autoriser.
 Atome hors liste	Crée une liste d'atomes à exclure.

Pour spécifier des atomes d'interrogation lors d'une recherche substructure, cliquez sur le bouton souhaité dans la série d'outils, puis cliquez sur l'atome de la structure que vous souhaitez remplacer par l'atome d'interrogation.

Note Lorsque vous marquez des atomes d'interrogation dans une structure, vous ne pouvez utiliser la structure qu'en tant que base d'interrogation de recherche. Vous ne pouvez pas

stocker cette structure dans une base de données, sauf la base de données ACD/SpecDB, version 6.0 ou suivantes.

Pour plus d'informations sur la procédure de recherche substructure, reportez-vous à l'Aide en ligne du programme correspondant.

3.7.2 Boutons Liaison d'interrogation

Ces boutons activent la série d'outils permettant de spécifier les liaisons d'interrogation lors d'une recherche substructure. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton pour faire apparaître des boutons supplémentaires :

Bouton	Description
 N'importe quelle liaison	La liaison marquée peut être n'importe quel type de liaison (simple, double, triple ou aromatique).
 Liaison aromatique	La liaison marquée ne peut être qu'aromatique.
 Liaison simple/double	La liaison marquée ne peut être que simple ou double (mais pas aromatique ou triple).
 Liaison anneau	La liaison marquée doit faire partie d'un anneau (annule la chaîne).
 Liaison chaîne	La liaison marquée doit faire partie d'une chaîne (annule l'anneau).

Pour spécifier des liaisons d'interrogation lors d'une recherche substructure, cliquez sur le bouton souhaité dans la série d'outils, puis cliquez sur la liaison de la structure que vous souhaitez remplacer par la liaison d'interrogation.

Note Lorsque vous marquez des liaisons d'interrogation dans une structure, vous ne pouvez utiliser la structure qu'en tant que base d'interrogation de recherche. Vous ne pouvez pas stocker cette structure dans une base de données, sauf la base de données ACD/SpecDB, version 6.0 ou suivantes.

Pour plus d'informations sur la procédure de recherche substructure, reportez-vous à l'Aide en ligne du programme correspondant.

3.7.3 Boutons atomes

Ces boutons peuvent être utilisés pour insérer rapidement les atomes des éléments souhaités dans l'espace de travail sans ouvrir la boîte de dialogue **Table Périodique des Éléments** (pour plus d'informations, voir la Section 3.13.5). Cliquez sur le bouton d'atome souhaité dans la barre d'outil Atomes pour le choisir.

Vous pouvez effectuer l'une des opérations suivantes avec l'atome choisi:

- Cliquez dans l'espace vide pour insérer l'atome choisi.
- Activez l'outil **Dessin Normal**  et cliquez sur n'importe quel atome de l'espace de dessin pour le remplacer par l'atome choisi.
- Activez l'outil **Dessin Continu**  et double-cliquez sur un atome pour faire apparaître une nouvelle liaison simple avec l'atome choisi.
- Activez l'outil **Dessin de Chaînes**  et dessinez des chaînes d'atomes avec l'atome choisi comme point de liaison.

Pour plus d'informations sur ces outils, reportez-vous aux sections 3.6.5-3.6.7 correspondantes.

Si l'élément souhaité n'est pas listé dans la barre d'outils Atomes, cliquez sur  pour ouvrir la boîte de dialogue **Table Périodique des Éléments** où vous pouvez choisir l'élément souhaité (notez que l'élément sélectionné sera placé dans la barre d'outils Atome comme un nouveau bouton).

Pour supprimer de la barre d'outils Atomes des atomes sélectionnés par l'utilisateur, double-cliquez sur la barre d'outils.

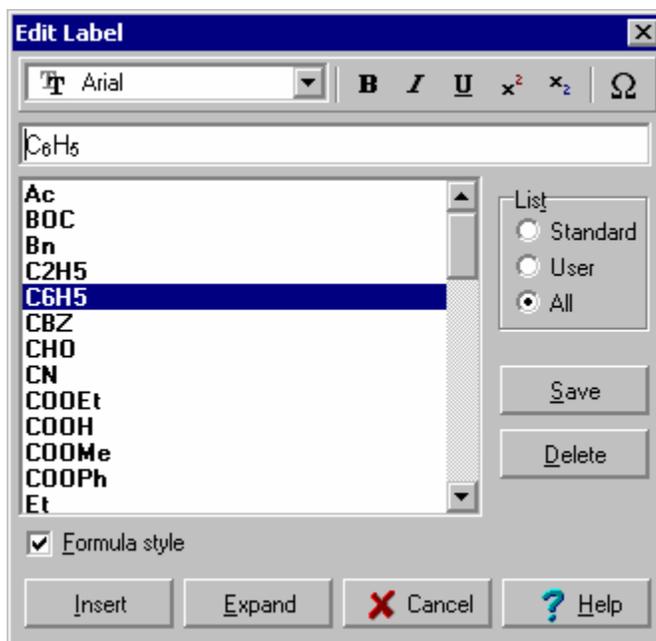
Pour les non métalliques, l'atome inséré apparaît dans sa valence la plus basse comme dérivé hydride, tandis que pour les métalliques, l'atome inséré apparaît dans son état d'oxydation le plus bas comme ion. Vous pouvez changer la charge atomique et/ou l'état d'oxydation d'un atome en utilisant les boutons

Charge d'Incrément (+)  ou **Charge de Décrément (-)**  (pour plus d'informations, voir la section 3.7.6) ou en dessinant de nouvelles liaisons chimiques à partir de cet atome. Vous pouvez également changer la charge atomique, la valence, l'état d'oxydation, le numéro de coordination, et le numéro d'isotope en cliquant sur **Propriétés Chimiques Atomiques**  (pour plus d'informations, voir la section 3.7.7).

3.7.4 Bouton Editer étiquette atome

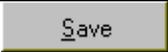
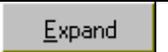
Ce bouton  active l'outil **Editer étiquette atome** permettant d'insérer une étiquette dans un espace vide, ou de remplacer n'importe quel atome dans une structure par une abréviation ou une étiquette de groupe qui peuvent alors être élargies. Pour insérer une étiquette, cliquez sur l'outil **Editer étiquette atome** puis cliquez sur l'atome désiré ou dans un espace vide. Dans la boîte de dialogue **Editer étiquette** qui apparaît, indiquez l'étiquette à insérer, puis cliquez sur **Insert**. Pour désactiver cet outil, faites un clic droit dans l'espace de travail. L'outil **Dessin Normal**  sera alors activé.

Note Vous pouvez alors changer le point de connexion de l'étiquette en utilisant l'outil **Changer la Position** (pour plus d'informations, voir la section 3.6.20).



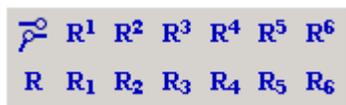
Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
<i>Zone Format</i>	Les outils de cette zone vous permettent de formater une étiquette saisie manuellement.
<i>Case Etiquette</i>	Dans cette case, saisissez l'étiquette que vous souhaitez insérer ou choisissez une étiquette parmi la liste au-dessous. Notez que les trois dernières étiquettes utilisées sont enregistrées

Option	Description
	dans la liste et affichées avec un haut rouge (elles ne peuvent pas être supprimées). Pour sauvegarder votre étiquette ou supprimer des étiquettes existantes, utilisez les boutons de droite. Pour afficher seulement les étiquettes Standard ou Utilisateur, utilisez les options dans la zone Liste .
Liste	Dans cette zone, sélectionnez l'option souhaitée pour spécifier le type d'étiquettes à afficher: toutes les étiquettes disponibles (All), seulement les étiquettes standard intégrées fournies par le programme (Standard), ou des étiquettes personnalisées créées précédemment (User).
	Sauvegarde l'étiquette spécifiée dans la case Label . Cette étiquette sera ajoutée à la liste d'étiquettes Utilisateur. Les étiquettes Utilisateur sont affichées en bleu foncé. Les trois dernières étiquettes saisies récemment sont sauvegardées dans la liste automatiquement. Elles sont affichées en rouge et ne peuvent pas être supprimées.
	Supprime l'étiquette sélectionnée de la liste. Notez que si vous essayez de supprimer les étiquettes standard intégrées, un message d'avertissement apparaît. Les trois dernières étiquettes saisies sont sauvegardées dans la liste automatiquement. Elles sont affichées en rouge et ne peuvent pas être supprimées.
	Remplace l'atome sélectionné par l'étiquette spécifiée ou insère l'étiquette dans l'espace de travail vide de la page ChemSketch.
	Développe l'étiquette spécifiée (la représente comme structure). L'étiquette d'atome peut être développée seulement si elle a été saisie en majuscules. De plus, seules les abréviations de groupe qui remplacent les atomes terminaux dans une structure peuvent être développées. Les symboles suivants sont reconnus par cet outil: '~' (tilde) - charge négative '+' (plus) - charge positive '-' (moins) - liaison simple (peut être omis) '=' (signe égal) - double liaison '%' (pourcentage) - triple liaison '()' (parenthèses) - englobe un groupe d'atomes Vous trouverez les conventions de développement d'étiquette dans le fichier EXPAND.TXT situé dans le dossier d'installation ACD/Labs (ACD10 pour la version 10.0). La colonne de gauche dans ce fichier contient des notations compatibles avec l'outil Développeur . Il n'est pas conseillé de modifier ce fichier. Si ACD/ChemSketch ne peut développer l'abréviation en cours, un message correspondant apparaît. Vous pouvez également développer les étiquettes insérées en utilisant la commande Développeur Formules Abrégées (pour plus d'informations, voir la Section 3.12.9).

3.7.5 Boutons Étiquette pseudo atome et radical

Ces boutons  /  activent la série d'outils permettant de remplacer des atomes par des étiquettes de radical ou des pseudo atomes. Si vous cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton, des boutons supplémentaires apparaissent :



Cliquez sur le bouton souhaité pour rendre l'outil correspondant actif, puis cliquez sur l'atome pour le remplacer par l'étiquette ou le pseudo atome.

Astuce Pour insérer des pseudo atomes, vous pouvez également double cliquer sur un atome en surbrillance pour visualiser le panneau **Propriétés** correspondant; dans la case **Value** de l'onglet **Atome**, sélectionnez '*Empty*', puis cliquez sur **Apply**.

Utilisez l'outil **Pseudo Atome**  pour créer des polymères à extrémités ouvertes et des liaisons coudées. Les liaisons coudées sont ignorées dans les calculs (elles sont traitées en tant que liaisons standard).

3.7.6 Boutons Particules de charge/radicalaires

Ces boutons activent la série d'outils permettant de changer la charge atomique ou de créer des radicaux à partir des atomes existants. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton pour afficher des boutons supplémentaires suivants :



Pour appliquer l'un de ces outils, cliquez sur le bouton souhaité puis sur l'atome que vous souhaitez modifier.

3.7.6.1 Boutons Charge d'incrément (+) et de décrément (-)

Ces boutons  /  activent les outils permettant de changer la charge d'un atome non métallique déterminé, ou à la fois la charge et l'état d'oxydation d'un métal déterminé. Pour appliquer les charges souhaitées, cliquez sur le bouton puis cliquez sur l'atome désiré dans l'espace de travail. La charge atomique et/ou l'état d'oxydation augmentent en incréments ou diminuent en décréments selon les états d'oxydations valables pour les métalliques ou les valences valables pour les non métalliques.

Note Ces deux options vous permettent seulement de changer la charge et/ou l'état d'oxydation d'un atome dans certaines limites. Pour les non métalliques, la charge peut être changée de -4 à +4 en général, alors que pour les métalliques la charge peut seulement être changée selon les états d'oxydation possibles fournis dans la Table Périodique des Eléments. Pour définir d'autres charges et/ou d'autres états d'oxydation, utilisez le panneau **Propriétés** ou le bouton **Propriétés Chimiques Atomiques** .

Vous pouvez passer de l'outil **Increment (+) Charge**  à l'outil **Decrement (-) Charge**  et inversement par un clic droit dans l'espace de travail.

3.7.6.2 Boutons Particules radicalaires

Le bouton **Radical**  active l'outil permettant de créer des radicaux. Un clic supplémentaire sur l'atome après avoir activé cet outil transforme cet atome en :

- Monoradical, par exemple CH_3^\bullet
- Biradical simple, par exemple $\text{CH}_2^{\bullet\bullet}$
- Biradical triple, par exemple $\bullet\text{CH}_2^\bullet$

Le bouton **Ion Radical Positif**  active l'outil permettant de créer des ions radicalaires positifs, par exemple $\text{CH}_4^{\bullet+}$. Pour cela, cliquez sur un atome après avoir activé cet outil.

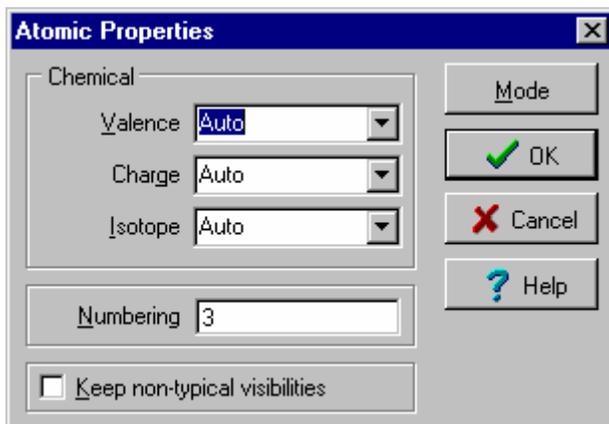
Le bouton **Ion Radical Négatif**  active l'outil permettant de créer des ions radicalaires négatifs, par exemple $\text{CH}_4^{\bullet-}$. Pour cela, cliquez sur un atome après avoir activé cet outil.

Note Un clic droit dans l'espace de travail après l'activation d'un des outils décrits ci-dessus permet de passer de l'un à l'autre.

3.7.7 Bouton Propriétés chimiques atomiques

Ce bouton  active l'outil **Propriétés chimiques atomiques** permettant de définir les nouvelles propriétés d'un atome dessiné. Pour éditer les propriétés de l'atome choisi, activez cet outil puis cliquez

sur l'atome. La boîte de dialogue **Propriétés atomiques** apparaît, et vous pouvez y définir les paramètres souhaités.

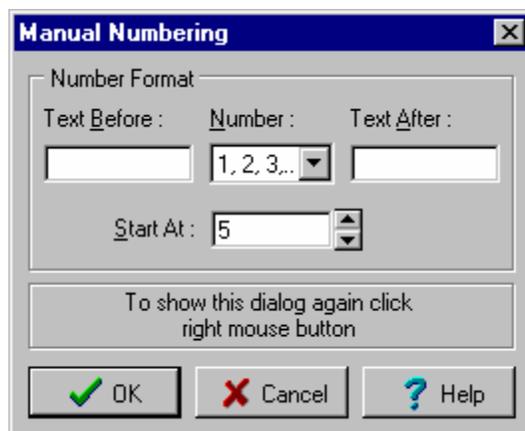


Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Valence	Saisissez la valeur de valence dans cette case. Ce doit être un chiffre compris entre 0 et 8.
Charge	Saisissez la valeur de charge dans cette case. Notez que vous pouvez également définir des particules radicalaires.
Isotope	Saisissez la valeur de la masse isotopique dans cette case.
Numérotation	Saisissez dans cette case une suite de chiffres ou de lettres à utiliser pour la numérotation de l'atome sélectionné.
Conserver les visibilités non-typiques	Cette case est disponible si vous avez défini manuellement certaines des caractéristiques visibles (par exemple, la présence de la valence ou d'un isotope) en utilisant le panneau Propriétés (voir la section 3.12.1). Pour conserver les caractéristiques visibles précédemment définies, sélectionnez cette case.
Mode	Sauvegarde les propriétés préalablement définies dans cette case, et les ajoute à la barre d'outils Atomes sous la forme d'un nouveau bouton Propriétés chimiques atomiques . En cliquant sur l'atome souhaité dans l'espace de travail après avoir activé ce bouton, les propriétés de l'atome seront modifiées en fonction. Notez que vous pouvez ajouter autant de boutons « propriétés » que vous le souhaitez. Pour supprimer tous les boutons personnalisés de la barre d'outils Atome, double cliquez dans la barre d'outils. Cliquez sur Yes dans le message qui apparaît.
Note	Pour changer le style (taille de police, couleur, etc.) des étiquettes de propriétés atomiques, utilisez le panneau Propriétés (voir la section 3.12.1).

3.7.8 Bouton Numérotation manuelle

En cliquant sur ce bouton  la boîte de dialogue **Numérotation manuelle** s'affiche. Vous pouvez y numérotter manuellement les atomes dans l'espace de travail.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Text Devant	Saisissez dans cette case le texte à insérer devant chaque numéro inséré.
Numéro	Dans la liste des styles de numéros disponibles, choisissez celui que vous souhaitez.
Text Derrière	Saisissez dans cette case le texte à insérer à la suite de chaque numéro inséré.
Commencer à	Saisissez dans cette case la valeur à partir de laquelle la numérotation doit commencer.
OK	En cliquant sur ce bouton, la boîte de dialogue se ferme et l'outil Numérotation manuelle est activé.
Annuler	Cliquer sur ce bouton ferme la boîte de dialogue et désactive l'outil Numérotation manuelle .
Astuce	Il est également possible d'afficher cette boîte de dialogue en effectuant un clic droit dans l'espace de travail après avoir activé l'outil Numérotation manuelle .

Étapes à suivre pour définir la numérotation atomique :

1. Dans la barre d'outils Atome, cliquez sur **Numérotation manuelle** pour faire apparaître la boîte de dialogue **Numérotation manuelle**.
2. Spécifiez le type de numérotation, et si nécessaire entrez le texte qui précédera et suivra un numéro, et spécifiez le numéro de départ.
3. Cliquez sur **OK**. Notez que le curseur devient . Cliquez ensuite sur l'atome désiré dans l'espace de travail. Le numéro de départ spécifié lui sera attribué. Des clics supplémentaires sur d'autres atomes de l'espace de travail poursuivront la numérotation.
4. Pour cesser la numérotation et désactiver l'outil **Numérotation manuelle**, cliquez sur un autre bouton.

Pour éditer la numérotation atomique, cliquez sur l'atome souhaité après avoir activé cet outil, et spécifiez de nouveaux paramètres dans la boîte de dialogue.

Note Il est possible de spécifier la couleur des numéros atomiques dans la case **Auto/Manual Numbering** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**). Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, voir la Section 3.14.1.2. Il est possible de modifier le style (taille de police, couleur, etc.) des étiquettes de numéros atomiques dans le panneau **Propriétés**. Pour plus d'informations sur ce panneau, voir la Section 3.12.1.

3.8 Barre d'outils Références

La barre d'outils **Références** est affichée verticalement sur la droite de l'espace de travail. Cette barre d'outils contient les boutons nécessaires à la création rapide et exacte de molécules à l'aide de modèles.

Cette barre d'outils contient les boutons suivants :

Bouton	Fonction
 Uniquement dans la version commerciale!	Affiche le dictionnaire ACD. Pour plus d'informations, voir la Section 3.13.6.
	Affiche le Tableau de Radicaux contenant les radicaux les plus fréquemment utilisés dans un dessin de structure rapide. Pour plus d'informations, voir la Section 3.13.4.
Boutons de raccourci pour les radicaux	Ces boutons de raccourci apparaissent lorsque vous sélectionnez l'un des radicaux dans le Tableau des Radicaux au moins une fois, et peuvent être supprimés de la barre d'outils en double cliquant dessus.

Note Pour personnaliser le contenu de la barre d'outils, faites un clic droit pour afficher le menu du raccourci. Pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.

3.9 Menu Fichier

Ce menu contient les commandes permettant de charger et sauvegarder des fichiers, importer et exporter des fichiers dans d'autres formats, imprimer votre travail, et configurer les formats d'imprimante et de page. Dans le menu **Fichier**, il vous est possible de visualiser l'historique des derniers fichiers chargés. Cliquez sur le fichier que vous souhaitez charger à nouveau.

3.9.1 Nouveau

Cette commande crée un nouveau document vide qui devient automatiquement actif.

Il n'est pas nécessaire d'exécuter la commande **Nouveau** au démarrage de ChemSketch. Le programme démarre avec un document vide, nommé NONAME00.SK2, actif dans l'espace de travail. Les nouveaux documents suivants sont nommés NONAME01.SK2, NONAME02.SK2, etc., jusqu'à ce qu'ils soient sauvegardés sous un nouveau nom de fichier.

Si plusieurs documents sont ouverts, il n'est possible de visualiser qu'un seul document à la fois : il n'est pas possible d'empiler ou de disposer en cascade des fenêtres document multiples. Tous les autres fichiers ouverts restent ouverts mais ne sont plus actifs. Pour rendre un document actif, sélectionnez-le dans la liste du menu **Documents**.

Note ACD/ChemSketch vous permet d'ouvrir jusqu'à dix documents simultanément. Si dix documents sont ouverts, la commande **Nouveau** devient inactive jusqu'à ce que l'un d'entre eux soit fermé.

Raccourci clavier: CTRL+F3

3.9.2 Ouvrir

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **Ouvrir Document** où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement du fichier .SK2 que vous souhaitez charger. Dès que le document est ouvert, son nom s'affiche dans le coin gauche de la barre d'état.

Note ACD/ChemSketch vous permet d'ouvrir jusqu'à dix documents simultanément. Si dix documents sont ouverts, la commande **Nouveau** devient inactive jusqu'à ce que l'un d'entre eux soit fermé.

Raccourcis :

Clavier :

F3

Barre d'outils générale :

**3.9.3 Fermer**

Cette commande ferme le document actif. Si vous avez effectué des changements depuis la dernière ouverture ou la dernière sauvegarde du document, on vous demande de confirmer ou non la sauvegarde des modifications. S'il s'agit du dernier document ouvert, ChemSketch crée automatiquement un document "noname". En fermant un document, ChemSketch vous invite à sauvegarder votre travail si cela n'a pas déjà été fait.

Astuce

Pour fermer tous les documents ouverts, choisissez **Fermer Tout** dans le menu **Documents**.

Raccourci:

Barre d'outils générale :

**3.9.4 Enregistrer**

Utilisez cette commande pour enregistrer le document actif en tant que fichier .SK2. Si vous enregistrez votre travail pour la première fois, la boîte de dialogue **Enregistrer Document Sous** apparaît, vous demandant de spécifier le nom de fichier et son emplacement. Si votre travail a déjà été enregistré, les paramètres de fichier existants sont utilisés (le nom et l'emplacement du fichier sont affichés sur la barre de titre).

Astuce

Si vous souhaitez modifier le nom ou l'emplacement d'un fichier existant, choisissez **Enregistrer sous** dans le menu **Fichier**. Pour sauvegarder tous les documents ouverts à la fois, choisissez **Enregistrer Tout** dans le menu **Fichier**.

Raccourci:

Clavier :

F2

Barre d'outils générale :

**3.9.5 Enregistrer sous**

Cette commande permet d'afficher la boîte de dialogue **Enregistrer Document Sous** où vous pouvez spécifier un nouveau nom de fichier et d'emplacement pour le document ChemSketch actuellement ouvert. Le fichier sera sauvegardé au format .SK2.

Astuce

Si vous souhaitez sauvegarder un fichier déjà existant sous le même nom de fichier et au même emplacement, choisissez **Enregistrer** dans le menu **Fichier**. Pour sauvegarder tous les documents ouverts à la fois, choisissez **Enregistrer Tout** dans le menu **Fichier**.

Raccourci clavier : SHIFT+F2

3.9.6 Enregistrer tout

Cette commande permet de sauvegarder tous les documents ouverts (il est possible d'en ouvrir jusqu'à dix à la fois) en tant que fichiers .SK2. Quand vous sauvegardez votre travail pour la première fois, la

boîte de dialogue **Enregistrer Document Sous** vous invite à spécifier le nom et l'emplacement de chacun des fichiers ouverts. Si un ou plusieurs des documents a déjà été sauvegardé, les noms de fichier et les emplacements existants sont utilisés.

Astuce Si vous souhaitez changer le nom ou l'emplacement d'un fichier existant, utilisez la commande **Enregistrer sous** dans le menu **Fichier**. Pour sauvegarder le document en cours, choisissez **Enregistrer** dans le menu **Fichier**.

Raccourci clavier : SHIFT+F12

3.9.7 Exporter

Cette commande permet d'exporter le contenu du document actif dans l'un des formats externes compatibles. Cette commande affiche la boîte de dialogue **Export** où vous pouvez spécifier le format, le nom, et l'emplacement du fichier à exporter.

Les versions 8.0 et suivantes sont compatibles avec les formats suivants :

- Windows Bitmap (.BMP, .DIB)
- Windows Metafiles (.WMF)
- Paintbrush (.PCX)
- TIFF Bitmaps (.TIF)
- GIF Bitmaps (.GIF)
- MDL Molfiles (.MOL)
- ISIS/Sketch (.SKC)
- CambridgeSoft ChemDraw (.CHM,.CDX)
- REACCS rxnfile (.RXN)
- Fichiers CML (.CML)
- Adobe Acrobat (.PDF)

Si vous exportez des données vers un format TIFF Bitmap, vous pouvez définir des options dans la boîte de dialogue **TIFF Options**, qui peut être affichée en cliquant sur **Options**.

Important Vous ne pouvez exporter de structures que vers des fichiers aux formats ISIS/Sketch BIN-file, CambridgeSoft ChemDraw et MOL.

3.9.7.1 Boîte de dialogue Options Export TIFF

Cette boîte de dialogue vous permet de configurer la résolution d'image souhaitée pour le fichier actif sur lequel vous travaillez, ce qui vous aidera lors de l'exportation des graphiques. La résolution par défaut est de 300 DPI.

Cette boîte de dialogue apparaît lorsque vous cliquez sur **Options**  dans la boîte de dialogue **Export**. Choisissez ensuite **TIFF Bitmap (.TIF)** dans la liste déroulante **Set as type**.

3.9.8 Importer

Cette commande vous permet d'importer des objets sous l'un des formats externes compatibles. Elle affiche la boîte de dialogue **Import** où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement du fichier à importer.

Les formats suivants sont compatibles:

- Windows Metafiles (.WMF)^{*}
- MDL molfiles (.MOL)
- ChemSketch 1.0 (.MST, .RPT)
- CS ChemDraw (.CHM, .CDX)[†]
- REACCS rxnfiles (.RXN)
- ISIS/Sketch (.SKC)[‡]

Les structures importées conservent leur configuration et leur valeur chimique d'origine. Vous pouvez modifier et manipuler les structures importées, les enregistrer dans un nouveau fichier, les imprimer, les insérer dans d'autres applications Windows, et calculer leurs propriétés chimiques.

Il est possible que certaines des molécules importées soient d'une taille non prise en charge par le système. Dans ce cas, la boîte de dialogue **Avertissement Import** apparaît. Pour redimensionner la molécule, cliquez sur **Yes**.

3.9.9 Lancer ChemBasic

Cette commande permet d'afficher la boîte de dialogue **Lancer le Programme**, où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement d'un programme (.BAS) écrit en langage ACD/ChemBasic. Le programme est lancé lorsque vous cliquez sur **OK**. Vous avez la possibilité de créer ces programmes vous-même ou d'utiliser ceux disponibles gratuitement en bonus (pour plus d'informations, reportez-vous à l'annexe C) depuis notre site Web.

Les programmes ACD/ChemBasic possèdent des boutons de raccourci qui peuvent être placés sur une barre d'outils à l'aide de la commande **Organiseur ChemBasic** (Menu **Options**). Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.14.9.

3.9.10 Gestionnaire de Formulaires

Cette commande ouvre la boîte de dialogue **Forms Manager** où vous pouvez créer des formulaires de renseignements pour les programmes ACD/ChemBasic. Pour plus d'informations sur ACD/ChemBasic et le Gestionnaire de Formulaires ACD, reportez-vous à la documentation correspondante.

3.9.11 Mise en page

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **Page Setup** où vous pouvez spécifier les paramètres de mise en page pour le document entier ou pour la page en cours.

Elle comprend les options suivantes :

Option	Description
Size&Orient	Dans cet onglet vous pouvez spécifier le format de papier et l'orientation du dessin : portrait ou paysage. (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.9.11.1).
Margins	Dans cet onglet vous pouvez définir les marges de la page à imprimer. (pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.9.11.2).
Poster	Dans cet onglet vous pouvez définir le nombre de pages dont votre poster sera constitué (si vous avez l'intention d'imprimer un poster). Pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.9.11.3.

^{*} Lors de l'importation de Metafiles Windows, notez que les bitmaps du fichier importé ne seront pas placés dans ACD/ChemSketch.

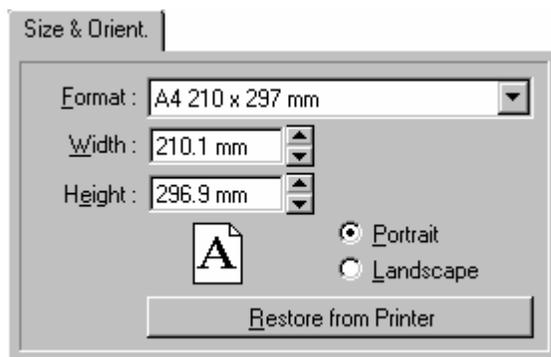
[†] Vous pouvez importer des objets à partir des fichiers CS Chemdraw des versions 3.0 et suivantes.

[‡] Vous pouvez importer des objets depuis les fichiers ISIS/Sketch BIN de n'importe quelle version, mais pour les fichiers des versions postérieures à la version 2.0, il est possible que quelques caractéristiques nouvelles soient absentes.

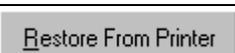
Apply To	Dans cette case vous pouvez choisir d'appliquer les paramètres sélectionnés dans la boîte de dialogue au document entier (Whole Document) ou à la page en cours du document en cours seulement (Current Page). Si le document ne comporte qu'une seule page, cette option n'est pas disponible.
<i>Preview Field</i>	Affiche les résultats des paramètres sélectionnés.
	Enregistre la taille de papier, l'orientation et les marges actuellement choisies en tant que par défaut.
	Permet de passer des paramètres actuels aux derniers paramètres par défaut acceptés. Si aucun paramètre par défaut n'a été établi récemment, ce bouton n'a aucun effet.

3.9.11.1 Boîte de dialogue Mise en page : Onglet Taille et Orientation

Dans cet onglet vous pouvez spécifier le format du papier et l'orientation de la ou des pages : portrait ou paysage.



Cet onglet contient les options suivantes:

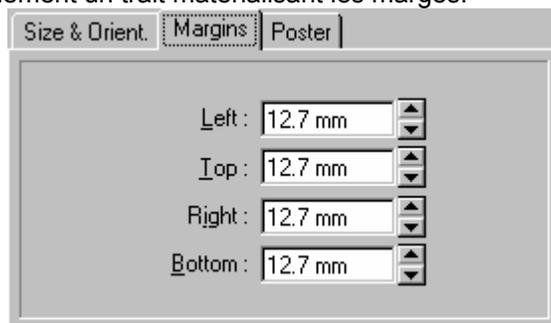
Option	Description
Format	Dans cette case vous pouvez choisir la taille de papier disponible dans votre imprimante. En choisissant le format de papier, les cases Width et Height affichent les valeurs correspondantes. Si vous choisissez <i>Custom Size</i> , vous pouvez définir votre propre format.
Width	Cette case affiche la largeur [§] du format de papier actuellement défini. Dès que vous commencez à saisir votre propre valeur, la case Format indique <i>Custom Size</i> .
Height	Cette case affiche la hauteur ^{**} du format de papier actuellement défini. Dès que vous commencez à saisir votre propre valeur, la case Format indique <i>Custom Size</i> .
Portrait	Le choix de cette option vous permet d'imprimer le document de manière à ce que le côté le plus court du papier soit horizontal. Reportez-vous à la zone Preview pour obtenir un aperçu avant impression.
Landscape	Le choix de cette option vous permet d'imprimer le document de manière à ce que le côté le plus long du papier soit horizontal. Reportez-vous à la zone Preview pour obtenir un aperçu avant impression.
	Modifie la configuration de page actuelle (seulement la taille et l'orientation du papier) pour passer aux paramètres définis par l'imprimante.

3.9.11.2 Boîte de dialogue Mise en page : Onglet Marges

[§] Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres, saisissez les valeurs et ajoutez l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. Les valeurs seront recalculées dans l'unité de mesure correspondante.

^{**} Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres, saisissez les valeurs et ajoutez l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. Les valeurs seront recalculées dans l'unité de mesure correspondante.

Cet onglet vous permet de définir les marges de la page à imprimer. Cette fonction n'interfère pas avec votre dessin ; elle trace simplement un trait matérialisant les marges.



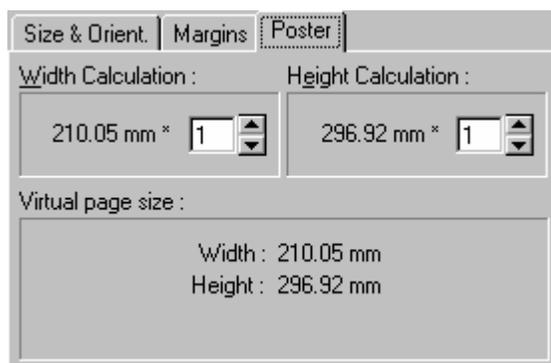
Cet onglet contient les options suivantes :

Option	Description
Left	Dans ces cases, spécifiez la quantité d'espace** entre les bords gauche/haut/droit/bas du papier et la marge correspondante de la page.
Top	
Right	
Bottom	

Pour faire apparaître les marges sur la ou les pages ChemSketch, sélectionnez la case **Page Margins** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **General**). Pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, reportez-vous à la Section 3.14.1.1.

3.9.11.3 Boîte de dialogue Mise en page : onglet Poster

Si vous avez l'intention d'imprimer le poster, vous pouvez dans cet onglet définir le nombre de pages dont votre poster sera constitué.



Cet onglet contient les options suivantes :

Option	Description
--------	-------------

Width Calculation	Dans cette case vous pouvez entrer le nombre de pages standard (les dimensions de page sont indiquées dans l'onglet Size & Orientation) pour la largeur du poster. Notez que le nombre de pages maximal pour la largeur est de 5. La taille du poster calculée sera affichée dans la zone Virtual Page Size .
Height Calculation	Dans cette case entrez le nombre de pages standard (la taille de page standard est indiquée dans l'onglet Size & Orientation) pour la hauteur du poster. Notez que le nombre de pages maximal pour la hauteur est de 4. La taille du poster calculée sera affichée dans la zone Virtual Page Size .*
Virtual Page Size	Cette zone indique la taille virtuelle calculée d'un poster.

3.9.12 Imprimer

Cette commande vous permet d'imprimer le document actif en utilisant les propriétés par défaut actuelles de l'imprimante. Pour une impression appropriée de votre travail, assurez-vous de la bonne configuration et connexion de votre environnement Microsoft Windows et de votre imprimante. Reportez-vous au *Guide de l'utilisateur Microsoft Windows* pour plus de détails.

Le choix de cette commande affiche la boîte de dialogue **Print** où vous pouvez spécifier quelles pages du document vous souhaitez imprimer, le nombre d'exemplaires imprimés, et l'imprimante à utiliser.

Note Lorsque vous commencez à imprimer la page colorée, une boîte de message apparaît et vous demande si vous souhaitez imprimer la page avec la couleur d'arrière-plan définie. Si vous choisissez **Non**, la couleur d'arrière-plan définie sera ignorée et la page restera blanche. Soyez prudent lorsque vous annulez l'impression de la couleur d'arrière-plan : si vous avez, par exemple, un arrière-plan noir et les structures dessinées en blanc, les structures ne seront pas visibles à l'impression si vous annulez la couleur d'arrière-plan.

Racourcis :

Clavier : CTRL + P

Barre d'outils générale : 

3.9.13 Aperçu avant impression

Cette commande vous permet d'afficher chaque page telle qu'elle apparaîtra à l'impression. Il est possible de visualiser plusieurs pages simultanément, et d'agrandir ou de réduire la taille de la page à l'écran.

L'aperçu qui apparaît comprend les boutons suivants :

Bouton	Fonction
	Imprime le document actif.
	Zoom avant pour obtenir une vue rapprochée du document. Vous pouvez effectuer un zoom avant en utilisant le bouton dans le mode Aperçu avant Impression ou en appuyant sur le SIGNE PLUS (+) sur le clavier numérique.
	Zoom arrière pour obtenir une vue plus large de la page (pages multiples) dans une taille réduite. Vous pouvez effectuer un zoom arrière en utilisant le bouton dans le mode Aperçu

* Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres saisissez les valeurs et ajouter l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. Les valeurs seront recalculées.

Bouton	Fonction
	avant Impression ou en appuyant sur le SIGNE MOINS (-) sur le clavier numérique.
	N'affiche qu'une page seulement. Vous pouvez également afficher une seule page en appuyant sur la touche ASTERISQUE (*) sur le clavier numérique.
	Affiche la première page du document en cours.
	Affiche la page précédente du document en cours (s'il en existe).
	Affiche la page suivante du document en cours (s'il en existe).
	Affiche la dernière page du document en cours (s'il en existe).
	Pour quitter l'aperçu avant impression et revenir à la vue précédente du document.

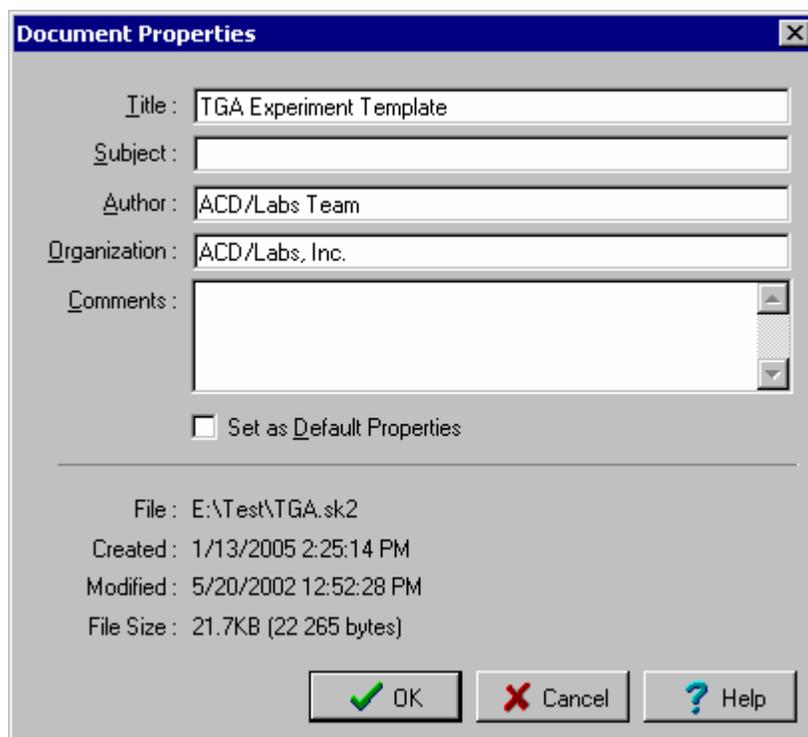
3.9.14 Configuration de l'imprimante

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Print Setup** où vous pouvez choisir l'imprimante et le port. Vous pouvez aussi définir d'autres options d'impression telles que la résolution de l'imprimante.

Note Cette commande n'apparaît pas dans Windows 2000/XP.

3.9.15 Propriétés

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Propriétés du document**, qui permet de définir les propriétés (un titre descriptif, le sujet, le nom de l'auteur, l'organisation, et d'autres informations sur l'utilisateur dans le fichier) du document ACD/ChemSketch actif, ce qui vous aidera dans le suivi des données.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Titre	Saisissez le titre que vous voulez utiliser quand vous chercherez ce fichier.
Sujet	Saisissez le sujet du fichier. Utilisez cette propriété pour regrouper des fichiers similaires, afin de pouvoir rechercher tous les fichiers ayant le même sujet.
Auteur	Par défaut, ce champ contient votre nom d'utilisateur système. Pour changer l'auteur, effacez le nom existant et saisissez-en un nouveau.
Organisation	Saisissez le nom de votre entreprise.
Commentaires	Entrez des commentaires concernant votre fichier.
Set as Default Properties	Si vous sélectionnez cette case, les informations spécifiées dans cette boîte de dialogue seront automatiquement insérées dans les propriétés des nouveaux documents créés.
Statistiques	Affiche les dates de création et de modification du document et la taille du fichier

3.9.16 Envoyer > Tel quel / En tant que PDF

Utilisez ces commandes pour envoyer le document en cours par email en tant que fichier .SK2 ou fichier .PDF.

En choisissant la commande appropriée, votre gestionnaire de boîte mail par défaut démarre, et un nouveau message est créé avec le document en cours en pièce jointe (en tant que fichier .SK2 ou fichier .PDF). Notez que cette commande ne peut fonctionner correctement si aucun gestionnaire de boîte mail n'est défini en tant que Par Défaut.

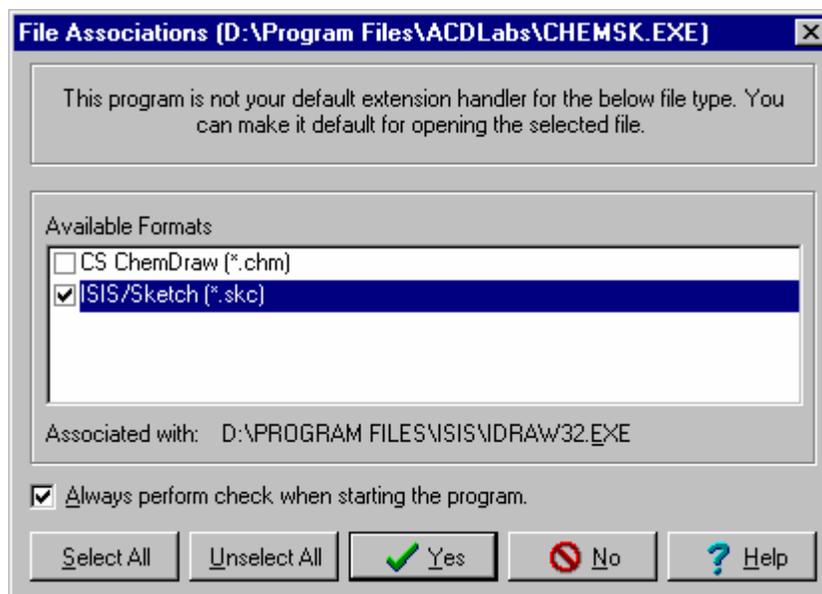
Si vous avez ouvert un document enregistré et l'avez édité sans sauvegarder les changements, le document pièce jointe aura le même nom que le fichier source mais il contiendra tous les changements que vous avez effectués jusqu'au moment de l'envoi.

Si vous avez ouvert un nouveau document et que vous ne l'avez pas encore sauvegardé, ACD/ChemSketch lui donnera un nom par défaut (*noname 01, 02...*).

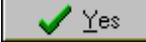
Note Cette commande n'est pas disponible si un nouveau document est actuellement ouvert et n'a pas encore été édité.

3.9.17 Associations de fichiers

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **File Associations** où vous pouvez assigner certains formats de fichier à ACD/ChemSketch.



Les options suivantes sont disponibles à partir de cette boîte de dialogue:

Option	Description
Available Formats	Cette fenêtre contient les formats qui peuvent être associés au programme. Sélectionnez les cases des formats devant être associés à ACD/ChemSketch. La zone Associated with affiche l'application à laquelle le format actuellement en surbrillance est lié.
Always perform check when starting the program	Si cette case est sélectionnée, à chaque démarrage d'ACD/ChemSketch le programme vérifiera si il existe des formats compatibles avec votre version et non encore associés à elle. S'il y en a, cette boîte de dialogue s'affichera au démarrage.
	Cliquez sur ce bouton pour sélectionner tous les formats de fichier du champ Available Formats .
	Cliquez sur ce bouton pour annuler la sélection de tous les formats de fichier du champ Available Formats .
	Cliquez sur ce bouton pour fermer la boîte de dialogue en appliquant les paramètres choisis.
	Cliquez sur ce bouton pour fermer la boîte de dialogue sans appliquer d'association.

Si les formats de fichier ont déjà été associés au programme, le message correspondant sera affiché.

Si vous ouvrez la boîte de dialogue **File Associations** sous Windows NT mais n'êtes pas autorisé à modifier les associations de fichiers, un message d'avertissement apparaît. Contactez votre administrateur système pour résoudre ce problème.

Note Vous pouvez modifier l'association de fichiers par l'intermédiaire de Windows Explorer : maintenez la touche SHIFT enfoncée et faites un clic droit sur le fichier choisi. Puis, à partir du menu raccourci qui apparaît, choisissez **Open With** et spécifiez l'application à utiliser pour ouvrir le fichier.

3.9.18 Quitter

Utilisez cette commande pour fermer ACD/ChemSketch. Notez que si d'autres programmes provenant du logiciel ACD/Labs sont en cours d'utilisation, ils ne seront pas fermés par cette commande. Pour fermer tous les programmes, dans le menu **ACD/Labs**, choisissez **Close All**.

Note ChemSketch vous demandera si vous souhaitez sauvegarder votre travail, à moins que vous ne veniez de le faire.

Raccourcis :

Clavier : ALT+X
Souris : double-cliquez sur le bouton de menu Contrôle d'application (dans le coin supérieur gauche de la fenêtre).

3.9.19 Historique

Utilisez ces commandes de sous-menu pour afficher les fichiers ouverts récemment.

Vous pouvez afficher le fichier ouvert ce jour, le jour précédent, les 7, 14, ou 30 derniers jours, ou les 12 derniers mois. Pour effacer l'Historique, choisissez **Clear History** dans les commandes de sous-menu de l'Historique.

Note Si vous enregistrez un document dans un format qui n'est pas compatible avec la commande **Import** d'ACD/ChemSketch, ce fichier ne sera pas affiché dans la liste des derniers fichiers ouverts.

3.10 Menu Edition

Les commandes de ce menu permettent l'édition du contenu de dessins, c'est-à-dire les opérations couper, copier, coller, annuler.

3.10.1 Annuler

Cette commande permet d'annuler les dernières opérations effectuées. Cette commande peut être utilisée jusqu'à 50 fois de suite afin qu'il soit possible de rétablir presque toutes les étapes précédentes de votre travail. Pour inverser l'effet de la commande **Undo**, utilisez **Redo** dans le menu **Edition**.

Raccourcis :

Clavier : ALT+ touche d'effacement arrière
Barre d'outils générale : 

3.10.2 Rétablir

Cette commande permet d'annuler la dernière opération effectuée par la commande **Undo**. Cette commande peut être utilisée séquentiellement jusqu'à 50 fois de sorte que vous puissiez rétablir pratiquement toutes les étapes de l'édition de votre travail. Pour inverser l'effet de la commande **Redo**, utilisez **Undo** dans le menu **Edition**.

Note La commande **Redo** ne peut être utilisée qu'une seule fois pour chaque commande **Undo** correspondante.

Raccourcis :

Clavier : SHIFT + ALT + touche d'effacement arrière
Barre d'outils générale : 

3.10.3 Couper

Cette commande ôte les objets sélectionnés de l'espace de travail et les place dans le presse-papier. Une fois que des objets se trouvent dans le presse-papier, ils peuvent être collés dans d'autres applications Microsoft Windows ainsi que dans d'autres documents provenant d'ACD/ChemSketch, ou d'autres parties du même document.

Note Lorsque vous collez des structures copiées à partir d'ACD/ChemSketch vers d'autres applications (par exemple Microsoft Excel), il est possible que la structure soit représentée par une liste de nombres et de statistiques (en tant que fichier mol MDL). Pour coller une image de la structure, utilisez la commande **Paste Special** dans l'application vers laquelle vous souhaitez coller. Parmi les options de collage, choisissez soit l'option **ACD ChemSketch Object** soit l'option **Picture**. La première option insert la structure en tant qu'objet OLE, vous permettant ainsi d'éditer la structure insérée via ChemSketch par un double clic sur l'image.

Raccourcis :

Clavier : CTRL+X
 Barre d'outils générale : 

3.10.4 Copier

Cette commande copie les objets sélectionnés dans le presse-papier. Une fois les objets dans le presse-papier, vous pouvez coller l'objet sélectionné dans d'autres applications Microsoft Windows ainsi que d'autres documents ACD/ChemSketch, ou d'autres parties du même document.

Note Lorsque vous collez des structures copiées à partir d'ACD/ChemSketch vers d'autres applications (par exemple Microsoft Excel), il est possible que la structure soit représentée par une liste de nombres et de statistiques (en tant que fichier mol MDL). Pour coller une image de la structure, utilisez la commande **Paste Special** dans l'application où vous destinez le collage. Parmi les options de collage, choisissez soit l'option **ACD ChemSketch Object** soit l'option **Picture**. La première option insert la structure en tant qu'objet OLE, vous permettant ainsi d'éditer la structure insérée via ChemSketch par un double clic sur l'image.

Raccourcis :

Clavier : CTRL+ C
 Barre d'outils générale : 

3.10.5 Coller > Par Défaut

Cette commande colle le dernier objet ajouté au presse-papier dans le document. Une fois que cette commande a été sélectionnée, le curseur apparaît avec l'ombre de l'objet du presse-papier s'y accrochant. Cliquez sur l'emplacement désiré pour y placer l'objet.

Note Si l'objet a été placé dans le presse-papier à partir d'une application externe (et non à partir de la fenêtre ACD/ChemSketch), il sera collé comme un objet incorporé et pourra être édité dans son application d'origine. Pour coller l'objet dans différents formats de presse-papier, dans le menu **Edition** pointez sur **Paste**, puis choisissez **Special**.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + V

Barre d'outils générale : **3.10.6 Coller > Remplacer**

Cette commande colle une copie du contenu du presse-papier à l'endroit où la copie a été faite. Si l'objet est copié ou coupé à partir d'une application externe (autre qu'ACD/ChemSketch), il sera collé dans le coin supérieur gauche de la page.

Note Pour coller l'objet à un endroit arbitraire de l'espace de travail, à partir du menu **Edition**, pointez sur **Paste** puis choisissez **Default**.

Raccourci clavier: CTRL + SHIFT + V

3.10.7 Coller > Special

Cette commande vous permet de coller des objets du presse-papier dans un format spécifique. Le choix de cette commande affiche la boîte de dialogue **Paste Special** avec les formats de presse-papier disponibles pour le contenu du presse-papier actuel. Sélectionnez le format nécessaire et cliquez sur **OK**. Le contenu du presse-papier apparaît attaché au curseur. Cliquez sur l'emplacement désiré pour y coller l'objet.

Pour éditer l'objet collé de cette façon, double-cliquez dessus. Si l'objet n'a pas été créé dans ACD/ChemSketch, mais dans une application externe (par exemple MS Excel), l'application correspondante démarrera (si elle est disponible sur votre ordinateur) et vous pourrez y éditer l'objet. Lorsque vous fermez l'application, les objets édités seront actualisés dans la fenêtre ChemSketch comme souhaité.

Note Pour insérer un objet créé avec une autre application ou pour le lier à une autre application et créer un objet sans quitter ACD/ChemSketch, à partir du menu **Edit**, choisissez **Insert Object**.

3.10.8 Coller > Structure

Cette commande colle une ou plusieurs structures chimiques à partir du presse-papier. Elle est utile pour insérer des structures chimiques qui n'ont pas été créées avec ACD/ChemSketch (par exemple, à partir de ISIS/Draw). Contrairement à la commande **Paste special**, cette commande dépose la ou les structures créées avec d'autres applications non en tant qu'images mais en tant que structures chimiques, de sorte que vous puissiez les éditer dans le mode Structure. Si le presse-papier ne contient pas de structure, cette commande est désactivée.

Note Les possibilités de la fonction **Paste Structure** sont limitées. Des structures peuvent donc ne pas être collées correctement.

3.10.9 Coller > Tableau

Cette commande colle le contenu du presse-papier dans l'espace de travail sous forme de tableau. Elle permet de coller des tableaux qui n'ont pas été créés dans ACD/ChemSketch (par exemple des tableaux MS Excel ou MS Word) et de les éditer comme des objets ChemSketch habituels. Contrairement à la commande **Paste > Special**, cette commande place le ou les tableaux créés avec d'autres applications non en tant qu'images ou objets incorporés mais comme un tableau ChemSketch que vous pouvez éditer dans le mode Dessin.

En choisissant cette commande, le contenu du presse-papier apparaît attaché au curseur. Cliquez sur l'endroit où vous voulez coller les objets copiés.

Note Pour insérer un objet créé avec une autre application dans votre document ChemSketch ou pour créer un lien vers une autre application et créer un objet sans quitter ACD/ChemSketch, dans le menu **Edit**, choisissez **Insert Object**.

3.10.10 Supprimer

Cette commande efface tous les objets sélectionnés de la page en cours sans les placer dans le presse-papier. Si vous voulez supprimer seulement des objets spécifiques, utilisez l'outil **Delete**  de la barre d'outils générale (pour plus d'informations, voir la section 3.5.1.)

Note Vous ne pouvez pas utiliser les commandes **Paste** pour récupérer les objets effacés avec **Delete**. Cependant vous pouvez les récupérer en utilisant la commande **Undo**.

Raccourci clavier : DELETE

3.10.11 Tout sélectionner

Cette commande sélectionne tous les objets de la page ChemSketch en cours. Pour plus de détails sur la manière de sélectionner/désélectionner des objets individuels dans le mode Structure, voir les sections 3.6.1-3.6.2.

Note Si la case **Select Graphics** est désactivée dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**), les objets créés dans le mode Dessin ne sont pas sélectionnés dans le mode Structure.

Raccourci clavier : CTRL + A

3.10.12 Insérer un objet

Cette commande permet d'intégrer un objet créé avec une autre application. Cette commande vous permet soit de créer l'objet (par exemple, créer une feuille de calcul, une image, une banque de données, etc.) soit d'insérer un objet préalablement créé dans votre dessin.

Étapes à suivre pour insérer un objet :

1. Choisir cette commande. La boîte de dialogue avec la liste des applications compatibles apparaît.
2. Sélectionner une application et cliquer sur **OK**. L'application, si elle est disponible et installée correctement, s'ouvrira.
3. Utiliser cette application pour créer, ouvrir ou modifier un fichier.
4. Quitter l'application et retourner dans ChemSketch. L'objet est intégré dans le coin supérieur gauche de la page ChemSketch.

Note Pour éditer l'objet intégré, à partir du menu **Edition**, choisir **Edit Object** ou double-cliquer sur l'objet.

3.10.13 Editer un objet

Cette commande vous permet d'éditer l'objet sélectionné intégré précédemment avec la commande **Insert Object**.

Lorsque vous sélectionnez l'objet et choisissez cette commande, l'application associée à l'objet est lancée. Après avoir effectué les changements nécessaires, quittez l'application et revenez dans ACD/ChemSketch où l'objet est automatiquement actualisé.

Note Vous devrez opérer dans le mode Dessin pour sélectionner et éditer la plupart des objets insérés, y compris les feuilles de calcul et les images.

Raccourci Souris : double-cliquer sur l'objet à éditer.

3.11 Menu Pages

Les commandes de ce menu permettent de créer, renommer, ou supprimer des pages, parcourir un document de plusieurs pages, et gérer les en-têtes et pieds de page de votre document.

3.11.1 Nouveau

Cette commande crée une nouvelle page vierge à la fin du document et la rend active. Un document peut contenir jusqu'à 100 pages.

Raccourci :

Barre d'outils générale :



3.11.2 Insérer

Cette commande crée une nouvelle page vierge avant la page en cours et la rend active.

Raccourci clavier : SHIFT + F3

3.11.3 Changer l'ordre

Cette commande vous permet de modifier l'ordre des pages dans votre document. Elle affiche la boîte de dialogue **Change order of Pages** où vous pouvez visualiser le numéro de la page en cours et spécifier un nouveau numéro de page par saisie ou en utilisant les flèches. Les autres pages sont réordonnées de manière correspondante. Notez que cette commande est désactivée si vous avez ouvert un document d'une seule page.

3.11.4 Supprimer

Cette commande retire la page en cours et son contenu du document en cours. Une fois qu'une page est supprimée, les pages restantes dans le document sont renumérotées.

ACD/ChemSketch ne vous demandera pas de confirmer cette suppression. Cependant, une fois supprimée, la page peut être récupérée avec la commande **Undo** jusqu'à ce que vous quittiez ChemSketch.

Raccourci clavier : SHIFT + F4

3.11.5 Renommer

Cette commande vous permet de renommer la page en cours d'un document. En cliquant sur cette commande, la boîte de dialogue **Rename Page** s'affiche. Dans la case **Page Name**, saisissez un nouveau nom pour la page en cours. Cliquez sur **OK**.

Les noms de pages assignés peuvent être visualisés sur la barre d'état quand vous cliquez sur **Page List** :



Note Vous pouvez utiliser le bonus **Number/Annotate Page** pour l'annotation des pages. Pour plus d'informations, reportez-vous à l'annexe C.

3.11.6 Colorer

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Page Color** où vous pouvez spécifier la couleur d'arrière plan de la page en cours. Choisissez la couleur à partir de la palette et cliquez sur **OK**. Cette commande définit à la fois la couleur de votre affichage et celle de la page à l'impression.

Note Quand vous lancez l'impression de la page colorée, une boîte de message apparaît vous demandant si vous souhaitez imprimer la page avec la couleur d'arrière plan définie. Si vous choisissez **No**, la couleur d'arrière plan définie sera ignorée et la page restera blanche. Attention quand vous annulez l'impression de la couleur d'arrière plan : si vous avez, par exemple, un arrière plan noir et que les structures sont dessinées en blanc, les structures ne seront pas visibles à l'impression si vous annulez la couleur d'arrière plan.

3.11.7 En-tête et pied de page > Editer

Cette commande affiche la barre d'outils **Header and Footer** qui vous permet de créer des en-têtes et des pieds de page pour les pages de votre document. Les en-têtes et les pieds de page peuvent prendre la forme de textes ou de graphiques. Comme dans d'autres applications, un en-tête apparaît au haut de la page et un pied de page apparaît au bas de la page.

La barre d'outils comprend les boutons suivants :

Bouton	Fonction
--------	----------

Bouton	Fonction
	<p>Insère des éléments communs en-tête ou pied de page dans votre document. Dans la liste déroulante, choisissez l'élément que vous souhaitez insérer en en-tête/pied de page. L'information est placée en étiquettes (texte caché concernant un document) contenant des accolades et des macro éléments. Les macro éléments ont la signification suivante :</p> <p>\$N – numéros de page \$S - numéros de page totaux \$A – nom d'auteur \$O – nom de l'entreprise \$L – titre du document \$J – sujet du document \$F – nom de fichier \$P – chemin d'accès avec nom de fichier \$T - heure \$D – date</p> <p>Après avoir formaté l'en-tête/pied de page et fermé la barre d'outils Header and Footer, le programme utilise le processus de remplacement macro. Le nom d'auteur, le nom de l'entreprise, le titre du document, et le sujet du document sont insérés à partir des paramètres de la boîte de dialogue Document Properties (reportez-vous à la Section 3.9.15).</p> <p>Pour éviter les erreurs, n'essayez pas d'insérer un paramètre macro à l'intérieur d'un autre. Ne modifiez pas les informations entre accolades; le programme les insère par défaut.</p>
	Insère des numéros de page automatiquement actualisés quand vous ajoutez ou supprimez des pages.
	Insère un champ pour l'heure automatiquement actualisé de manière à ce que l'heure en cours soit affichée lorsque vous ouvrez ou imprimez le fichier.
	Insère un champ pour la date automatiquement actualisé de manière à ce que la date en cours soit affichée lorsque vous ouvrez ou imprimez le fichier.
	Déplace le point d'insertion de gauche à droite dans le champ en-tête/pied de page, l'alignant ainsi à gauche, au centre, et à droite. Cliquez sur ce bouton autant de fois que nécessaire pour parvenir à la position souhaitée.
	Déplace le point d'insertion de droite à gauche dans le champ en-tête/pied de page, l'alignant ainsi à gauche, au centre, et à droite. Cliquez sur ce bouton autant de fois que nécessaire pour parvenir à la position souhaitée.
	Place le point d'insertion dans la marge en-tête.
	Place le point d'insertion dans la marge pied de page.
	Affiche la boîte de dialogue Open Document où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement de n'importe quel fichier .HFP enregistré précédemment et le charger dans le document en cours.
	Affiche la boîte de dialogue Save Document As où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement du fichier .HFP dans lequel vous souhaitez enregistrer l'en-tête/pied de page en cours.
	Ferme la barre d'outils En-tête et Pied de Page et applique vos paramètres.

Conseil

Vous pouvez utiliser cette fonction pour insérer une image d'arrière plan dans votre document. Dans le mode **Edit Header/Footer**, dessinez ou insérez une image et placez-la dans la position souhaitée sur la page. Lorsque vous quitterez le mode Edition, l'image apparaîtra en arrière plan de vos dessins.

3.11.8 En-tête et Pied de Page > Charger

Cette commande vous permet de charger l'en-tête et le pied de page précédemment enregistré dans un fichier .HFP.

3.11.9 En-tête et Pied de Page > Enregistrer

Cette commande vous permet d'enregistrer l'en-tête et le pied de page du document en cours dans un fichier .HFP, de sorte que vous puissiez ensuite le charger pour d'autres documents.

Si vous enregistrez l'en-tête/pied de page pour la première fois, la boîte de dialogue **Save Document As** apparaît.

3.11.10 En-tête et Pied de Page > Enregistrer sous

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **Save Document As** où vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement du fichier .HFP dans lequel vous souhaitez enregistrer l'en-tête/pied de page du document en cours.

3.11.11 En-tête et Pied de Page > Définir Par Défaut

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **Set Header/Footer Page as Default** où vous pouvez spécifier le fichier .HFP dont vous souhaitez utiliser l'en-tête/pied de page par défaut : l'en-tête et le pied de page sélectionnés seront automatiquement insérés dans les documents nouvellement créés.

Pour définir l'en-tête et le pied de page par défaut, cliquez sur **Set Current as Default**. Si vous n'avez pas encore enregistré votre en-tête et votre pied de page dans un fichier, le programme vous invitera à le faire. Dès que le fichier est enregistré, il est défini comme défaut.

Pour annuler l'en-tête et le pied de page par défaut, cliquez sur **Clear Default**.

3.11.12 En-tête et Pied de Page > Effacer

Cette commande retire à la fois l'en-tête et le pied de page du document en cours.

3.11.13 En-tête et Pied de Page > Afficher

Cette commande déclenche l'affichage des en-tête et pieds de page dans le document. Notez que cette commande est sélectionnée par défaut.

3.11.14 Précédent

Cette commande affiche la page précédente du document. Notez que cette commande est désactivée si vous avez ouvert un document d'une seule page.

Vous pouvez également cliquer sur **Page List** Page 64/85 (affiche le numéro de la page en cours et le nombre de pages total du document en cours) dans la barre d'état pour passer rapidement à la page souhaitée.

Raccourcis :

Clavier : PAGE UP

Barre d'état : **3.11.15 Suivant**

Cette commande affiche la page suivante du document. Notez que cette commande est désactivée si vous avez ouvert un document d'une seule page.

Vous pouvez également cliquer sur **Page List**  (affiche le numéro de la page en cours et le nombre de pages total du document en cours) dans la barre d'état pour passer rapidement à la page souhaitée.

Raccourcis :

Clavier : PAGE DOWN

Barre d'état : **3.11.16 Première**

Cette commande affiche la première page du document. Notez que cette commande est désactivée si vous avez ouvert un document d'une seule page.

Vous pouvez aussi cliquer sur **Page List**  (affiche le numéro de la page en cours et le nombre de pages total du document en cours) dans la barre d'état pour passer rapidement à la page souhaitée.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + HOME

3.11.17 Dernière

Cette commande affiche la dernière page du document. Notez que cette commande est désactivée si vous avez ouvert un document d'une seule page.

Vous pouvez aussi cliquer sur **Page List**  (affiche le numéro de la page en cours et le nombre de pages total du document en cours) dans la barre d'état pour passer rapidement à la page souhaitée.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + END

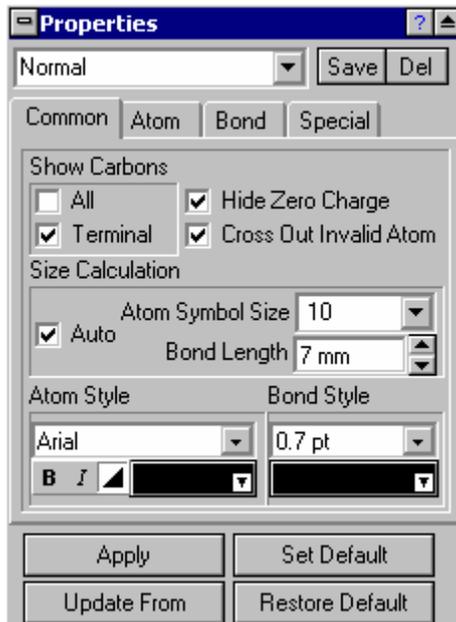
3.12 Menu Outils

Les commandes de ce menu permettent d'affiner une structure créée et de déterminer ses propriétés.

3.12.1 Propriétés de la structure

Cette commande affiche le panneau **Propriétés** contenant les propriétés de la ou des structures actuellement sélectionnées. Vous pouvez aussi ouvrir ce panneau par un double clic sur la structure avec

l'outil **Select/Move**  activé. Dans ce panneau, vous pouvez spécifier la représentation graphique des dessins chimiques.



Le tableau ci-dessous fournit une description générale des parties du panneau :

Option	Description
	Cette série d'options vous permet de charger les attributs de style à partir de tous les styles existants, d'enregistrer un style défini par l'utilisateur, et de supprimer un des styles définis par l'utilisateur. Pour charger un style , cliquez sur la flèche et choisissez le style à partir de la liste. Pour l'appliquer à la sélection, cliquez sur Apply au bas de ce panneau. Pour nommer votre propre style , sélectionnez les options désirées dans le panneau, cliquez dans cette case, saisissez le nom de votre style et cliquez sur Save . Pour effacer le style , sélectionnez-le dans la liste et cliquez sur Del .
Onglet Commun	Dans cet onglet, vous pouvez définir des paramètres communs aux atomes et aux liaisons de la ou des structures sélectionnées. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.1.1.
Onglet Atome	Dans cet onglet, vous pouvez définir les options de visualisation des atomes. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.1.2.
Onglet Liaison	Cet onglet contient des options pour modifier l'affichage des liaisons. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.1.3.
Onglet Spécial	Dans cet onglet, vous pouvez définir les paramètres de style de l'ombre des liaisons de Markush. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.12.1.4.
	Applique les paramètres de style choisis aux fragments de structure ou aux structures sélectionnées.
	Enregistre les paramètres de style choisis en tant que défaut : le style par défaut sera automatiquement appliqué à toutes les nouvelles structures dessinées.
	Active la fonction d'actualisation permettant de copier des attributs de style de la structure dessinée vers le panneau. Lorsque vous cliquez sur ce bouton, le curseur devient une flèche étiquetée From  . Cliquez sur une structure pour mettre à jour ses paramètres de style dans ce panneau.

Option	Description
Restore Default	Ce bouton rétablit les paramètres du style par défaut en cours dans le panneau.

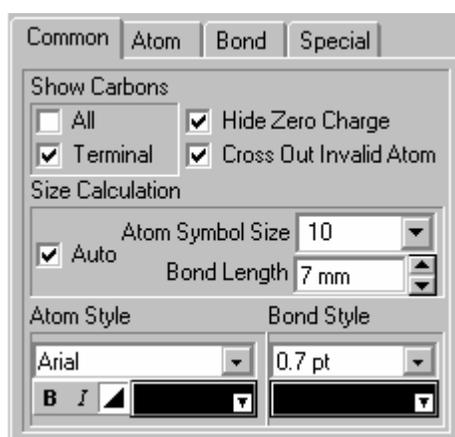
Raccourcis :

Clavier : CTRL + SHIFT + S

Souris : double-clic sur un fragment ou un atome

3.12.1.1 Panneau Propriétés : onglet Commun

Cet onglet vous permet de spécifier les paramètres de style des fragments de structure ou des structures sélectionnés.



Cet onglet contient les options suivantes :

Option	Description
Show Carbons	Les cases situées dans cette zone permettent de choisir si tous les carbones, ou les carbones terminaux seulement, doivent être affichés. Sélectionnez/Désélectionnez les cases All ou Terminal.* Si aucune des cases n'est sélectionnée, aucun carbone ne sera affiché dans la structure sélectionnée.
Hide zero Charge	Cette case détermine si les charges zéro doivent être affichées.*
Cross Out Invalid Atom	Cette case détermine si les atomes invalides doivent être éliminés. Si vous sélectionnez cette case, les atomes invalides seront automatiquement barrés d'un X.*
Size Calculation	Dans cette zone vous pouvez spécifier la taille du symbole atomique et la longueur de la liaison ^{††} . Notez que si la case Auto est sélectionnée, la longueur de liaison sera automatiquement calculée pour correspondre à la taille du symbole atomique entrée et <i>vice versa</i> .
Atom Style	Dans cette zone vous pouvez spécifier le style des étiquettes atomiques.

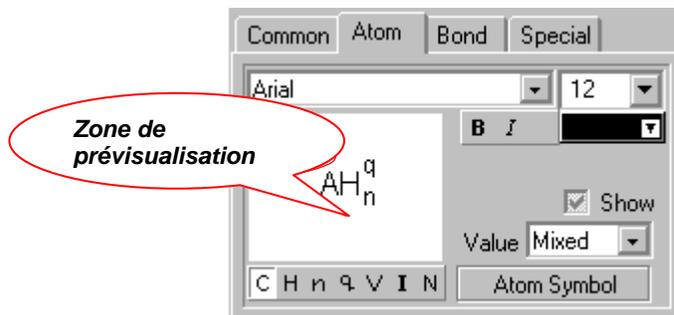
* Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois états : **désélectionnée**, l'option citée ne sera pas appliquée aux objets sélectionnés ; **sélectionnée**, l'option citée sera appliquée aux objets sélectionnés, et **grisée** (si l'état de l'option en cours est différent de celui des objets sélectionnés), cette option ne change pas l'option citée des objets sélectionnés.

^{††} Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres saisissez les valeurs et ajouter l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. Les valeurs seront recalculées.

Option	Description
	Si les atomes sélectionnés sont de mises en forme différentes, le bouton Own  est activé.
Bond Style	Dans cette zone vous pouvez définir l'épaisseur ^{‡‡} de trait et la couleur des liaisons.

3.12.1.2 Panneau Propriétés : onglet Atome

Dans l'onglet **Atome** vous pouvez spécifier les paramètres de style des étiquettes d'atomes sélectionnées.



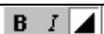
Chaque étiquette est représentée par un ensemble d'attributs :

	symbole atomique
	hydrogène
	indice
	charge
	valence
	isotope
	numérotation

Pour changer leurs paramètres, cliquez sur le bouton correspondant sous la zone de prévisualisation. Pour appliquer les mêmes paramètres de style à plusieurs sortes d'attributs atomiques à la fois, maintenez SHIFT enfoncé et cliquez sur le bouton choisi dans la rangée des attributs.

Astuce Si certaines des modifications apportées aux attributs en cours ne sont pas toutes affichées dans la zone de prévisualisation, appuyez sur ENTREE.

Les options suivantes sont disponibles :

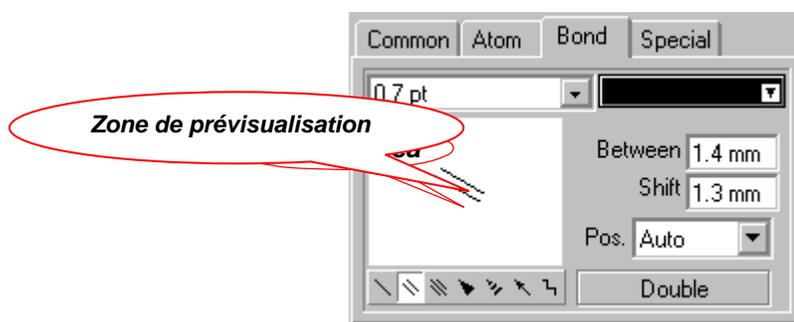
Option	Description
	Dans cette case vous pouvez spécifier le style de police à appliquer au(x) symbole(s) sélectionné(s) sous le champ de prévisualisation.
	Dans cette case vous pouvez spécifier la taille de police à appliquer au(x) symbole(s) sélectionné(s) sous le champ de prévisualisation.
	Permet de rendre les symboles correspondants dans les étiquette d'atomes gras / italiques / gras italiques . Si le bouton Own  est activé, cela signifie que l'attribut en cours a des formats multiples dans la sélection.

^{‡‡} Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres saisissez les valeurs et ajouter l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. Les valeurs seront recalculées.

Option	Description
	Permet de spécifier la couleur du ou des symboles sélectionnés sous le champ de prévisualisation.
Show Value	Cette case détermine si l'attribut sélectionné doit être affiché ou non dans la structure. Celle case est présente pour les symboles atomiques C , l'hydrogène H , la charge Q , la valence V , l'isotope I , et la numérotation N , et permet de définir la valeur correspondante pour ces attributs. Pour le symbole atomique, si vous choisissez Empty , aucun symbole atomique ne sera inséré. Pour le symbole hydrogène H , dans cette case vous pouvez spécifier la position de l'hydrogène : position automatique, gauche, droite, basse, ou haute, par rapport au symbole atomique de base. Notez que pour faire apparaître cette case dans le panneau vous ne devez auparavant sélectionner qu'un seul atome.
Y	Cette case est présente pour l'indice hydrogène n , la charge Q , la valence V , l'isotope I , et la numérotation N , et vous permet de définir les coordonnées Y** de l'attribut correspondant par rapport au symbole atomique de base.
After H	Cette case détermine la position du symbole de valence V dans l'étiquette d'atome. Si vous sélectionnez cette case, le symbole de valence sera placé après l'hydrogène.*
Soft	Sélectionnez cette case pour rendre la charge « douce ». La charge « adoucie » disparaît une fois que l'atome chargé est connecté à une liaison. Si cette case est désélectionnée, la charge spécifiée demeurera lorsqu'une connexion sera ajoutée à l'atome chargé. Notez que si vous augmentez ou diminuez la charge atomique en utilisant l'un des outils de Charge d'Incrément (+)  ou Charge de Décrément (-)  sur la barre d'outils Atome, les charges sont définies comme « douces ».*
X	Dans cette case, spécifiez la valeur X qui détermine la position du symbole de numérotation N par rapport à l'étiquette de l'atome le long de l'axe X. Notez que les coordonnées peuvent avoir une valeur négative.*

3.12.1.3 Panneau Propriétés: onglet Liaison

Dans l'onglet **Liaison**, vous pouvez spécifier les paramètres de style des liaisons sélectionnées.



Les types de liaisons suivants sont disponibles :

liaison simple

* Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois états : **désélectionnée**, l'option citée ne sera pas appliquée aux objets sélectionnés ; **sélectionnée**, l'option citée sera appliquée aux objets sélectionnés, et **grisée** (si l'état de l'option en cours est différent de celui des objets sélectionnés), cette option ne change pas l'option citée des objets sélectionnés.

** Les unités de mesure dans ces cases correspondent à celles définies dans la boîte de dialogue **Préférences** (Menu **Options**). Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres saisissez les valeurs et ajouter l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple *5 pt*. Les valeurs seront recalculées.

-  liaison double
-  liaison triple
-  liaison stéréo avant
-  liaison stéréo arrière
-  liaison de coordination
-  liaisons indéfinies

Pour changer les paramètres d'une de ces liaisons, cliquez sur le bouton correspondant sous la zone de prévisualisation. Pour appliquer les mêmes paramètres de style à plusieurs types de liaisons en même temps, maintenez la touche SHIFT enfoncée et cliquez sur les boutons souhaités dans la rangée des types de liaison.

Toute en apportant des changements dans l'onglet, vous pouvez visualiser l'apparence de la liaison dans la zone de prévisualisation.

Les options suivantes sont disponibles pour les attributs de liaisons :

Option	Description
	Dans cette case vous pouvez spécifier l'épaisseur du trait à utiliser pour le type de liaison correspondant.
	Dans cette case vous pouvez spécifier la couleur des traits de liaison du type sélectionné sous la zone de prévisualisation.
Between	Dans cette case vous pouvez spécifier la distance entre les traits des liaisons doubles  et des liaisons triples  .
Shift	Cette case est présente pour les liaisons doubles  et les liaisons triples  . Pour les liaisons doubles, elle permet de spécifier l'écart (c'est-à-dire la différence de longueur) entre les traits quand la liaison est définie comme asymétrique. Pour les liaisons triples, elle permet de spécifier la différence* entre la longueur du trait central et la longueur de deux autres traits dans une liaison.
Pos.	Dans cette case vous pouvez spécifier la position de deux traits dans une liaison double  l'un par rapport à l'autre. Vous pouvez visualiser la position spécifiée dans la zone de prévisualisation.
Width	Dans cette case vous pouvez définir l'épaisseur* de l'extrémité la plus large des liaisons stéréo avant  et arrière  , et la largeur* de sections des liaisons indéfinies  .
Step	Dans cette case vous pouvez spécifier l'écart entre les sections représentant des liaisons stéréo arrière  et des liaisons indéfinies  .
H. Length H. Width	Dans ces cases vous pouvez spécifier la longueur et la largeur de la tête de flèche d'une liaison de coordination  .

3.12.1.4 Panneau Propriétés: onglet Spécial

Dans l'onglet **Spécial** vous pouvez spécifier les paramètres de style de l'ombre des liaisons de Markush.

* Si plusieurs objets sont sélectionnés, ces cases peuvent avoir trois états : **vide**-n'applique pas l'option citée à tous les objets sélectionnés, **cochée**-applique l'option citée à tous les objets sélectionnés, et **grisée**-ne change pas l'option citée des objets sélectionnés.



Les options suivantes sont disponibles:

Option	Description
Show	Détermine si l'ombre de la liaison de Markush doit être visible ou non dans la structure.
 Solid	Cliquez sur ce bouton pour ombrer la liaison de Markush d'une couleur pleine. Vous pouvez spécifier la couleur de remplissage dans la case adjacente Box qui apparaît.
 Pattern	Cliquez sur ce bouton pour ombrer la liaison de Markush en utilisant un motif de traits diagonaux. Vous pouvez spécifier le prototype et la couleur des hachures dans les cases Color et Pattern situées sur la droite.
 Mixed	Lorsque le bouton Mixed est activé, il indique que l'état de l'ombre de la liaison de Markush dans les objets sélectionnés est différente et ne sera pas modifiée.
Color	Dans cette case, vous pouvez spécifier la couleur à appliquer à la liaison de Markush sélectionnée.
Pattern	Dans cette case, sélectionnez le motif de hachures souhaité.

3.12.2 Uniformiser la structure

Cette commande redessine et redimensionne la ou les structures chimiques sélectionnées pour uniformiser toutes les longueurs et les angles des liaisons. Si il y a plus d'une structure dans la page en cours et qu'aucune n'est sélectionnée, toutes les structures seront « nettoyées ».

La fonction **Clean Structure** uniformise toutes les longueurs et les angles des liaisons, en changeant de façon minimale les dislocations relatives de tous les atomes et fragments reliés de la molécule dessinée. Pour définir la représentation de structure, sélectionnez les cases souhaitées dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Clean**) (pour plus d'informations, voir la section 3.14.1.4).

Si le résultat n'est pas satisfaisant, utilisez le bouton **Undo**  pour annuler les changements effectués, changez les dislocations réciproques des atomes et fragments sélectionnés avec les outils **Select/Move**  ou **Select/Rotate/Resize**  et appliquez la commande **Clean Structure** à nouveau.

Raccourcis :

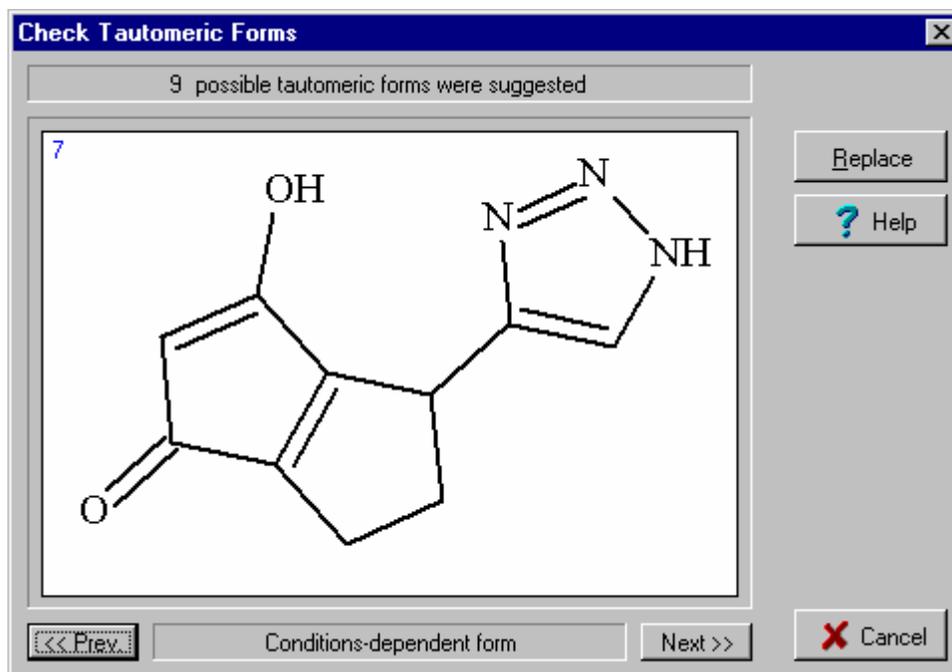
Barre d'outils Structure: 
Clavier : F9

3.12.3 Vérifier les formes tautomères

Cette commande vérifie et génère les formes tautomères les plus appropriées des structures organiques dessinées.

Dès que les formes sont générées, la boîte de dialogue **Check Tautomeric Forms** affiche une suggestion des formes tautomères prédominantes.

Note Si la structure dessinée est elle-même la forme prédéfinie principale, la sélection de cette commande affiche le message correspondant.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Information	Affiche le nombre de formes tautomères suggérées.
Structure	Affiche le dessin de la structure chimique lorsque la boîte de dialogue apparaît. En cliquant sur les boutons Suivant Next >> et Précédent << Prev. au-dessous, cette zone affiche les formes tautomères suggérées.
<< Prev. Next >>	Utilisez ces boutons pour parcourir les formes tautomères.
Replace	Remplace la structure dessinée par la structure actuellement affichée dans la zone Structure.

Raccourcis :

Barre d'outils Structure : 
Clavier : CTRL + SHIFT + T

3.12.3.1 Algorithme ACD/Tautomères

Les informations suivantes vous aideront à mieux comprendre les caractéristiques de l'algorithme en cours.

L'algorithme ACD/Tautomères reconnaît et prend en compte la plupart des types d'équilibre tautomère connus tels :

- les aldéhydes, les cétones, les thioaldéhydes, les thiocétones : les énols, les thioénols ;
- Imines, enamines
- Oximes, nitrocomposés nitriques
- Nitrocomposés, formes acides des nitrocomposés
- Les équilibres tautomères des oxy-, amino-, et thio- hétéroaromatiques substitués et non substitués à 5 et 6 membres.

Dans la plupart des cas, l'influence des groupes électroniques sur l'équilibre tautomère est également pris en compte.

Les principaux types d'équilibres tautomères connus suivants ne sont pas pris en compte dans l'algorithme ACD/Tautomères actuel:

- Les équilibres cycliques
- Les équilibres qui entraînent des changements de valence atomique
- Les équilibres qui sont trop lents sans catalyseur

L'algorithme ACD/Tautomères ne fonctionne pas avec les classes de structures chimiques suivantes :

- Les structures contenant des atomes métalliques
- Des structures contenant des atomes chargés, autres que les dérivés de l'azote (+) lié à oxygène (-)
- Les structures contenant des éléments de valence atypique
- Les structures avec liaisons de coordination
- Les structures contenant plus de 255 atomes

L'algorithme ACD/Tautomères actuel fournit seulement des suggestions de formes tautomères, pas nécessairement les formes correctes. La possibilité de formes tautomères différentes doit toujours être sérieusement envisagée, si le dessin de la structure organique contient deux liaisons doubles ou triples ou plus conjuguées ou attachées à des hétéroatomes d'oxygène, d'azote, de soufre ou autre. Consultez d'autres sources d'information pour prendre une décision définitive.

3.12.4 Optimisation de Structure 3D

Cette commande crée un modèle tridimensionnel réaliste d'une structure chimique plane (2D). Cette option peut être appliquée à une seule structure sélectionnée à la fois. Pendant l'optimisation, la barre d'état affiche la progression et vous permet d'annuler à tout moment. Une fois l'optimisation 3D terminée, le modèle 3D est automatiquement disponible pour une rotation 3D si la case **Switch to 3D-Rotation mode** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée (pour plus d'informations sur la boîte de dialogue, voir la section 3.14.1.2). Si cette case est désélectionnée, vous devez passer manuellement au mode Rotation 3D en cliquant sur l'outil **3D Rotation**  dans la barre d'outils Structure.

L'optimisation 3D est basée sur la mécanique moléculaire modifiée qui prend en compte l'étirement de liaison, l'angle, la rotation interne, et les interactions non liées de Van der Waals. Les modifications comprennent une légère simplification des fonctions potentielles et le renforcement du plan de minimisation par algorithmes heuristiques supplémentaires pour le traitement des « mauvaises » conformations initiales. L'algorithme d'optimisation 3D est une version brevetée de la mécanique moléculaire avec un champ de contrainte basé initialement sur le paramétrage CHARMM (voir B.R. Brooks, R.E. Bruccoleri, B.D. Olafson, D.J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus. CHARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations. *J. Comput. Chem.* 4, 187–217 (1983)). Les modifications entraînent des simplifications et ont été effectuées dans l'intention d'accroître la stabilité et la vitesse du traitement informatique. Notez que l'optimisateur 3D N'EST PAS un moteur de mécanique moléculaire à taille réelle. L'objectif de sa conception est de reproduire de manière fiable les conformations appropriées des dessins 2D (sans doute très inappropriés), plutôt que d'optimiser de manière précise des structures 3D.

L'optimisation 3D produit parfois une conformation moléculaire différente de ce qui était attendu. L'essence même de l'analyse conformationnelle réside dans le fait que les molécules possèdent typiquement de nombreuses conformations possibles. L'optimisateur n'en trouve qu'une, qui ne correspond pas nécessairement à celle qui était attendue. Par exemple, l'on s'attend probablement à ce qu'un fragment cyclohexane prenne la forme d'une chaise, mais il est possible que l'optimisateur génère une forme de bateau tordu, qui est également l'une de ses conformations appropriées (en fait ce fragment prend une forme tordue dans de nombreuses structures). Pour obtenir une nouvelle conformation, déplacez certains des atomes de la structure 3D résultante pour rendre la structure initiale plus proche de la conformation finale, puis optimisez la structure à nouveau.

Si vous essayez d'obtenir un énantiomère spécifique pour une structure à centres chiraux, lors de l'optimisation, les données entrées relatives à la configuration peuvent parfois se transformer en leur contraire. Pour résoudre ce problème, il suffit en général de dessiner les quatre substituants de l'atome chiral et d'utiliser les outils **Up** et **Down Stereo Bonds** pour définir la direction des liaisons souhaitée dans la structure 2D initiale. Si le résultat souhaité n'est pas obtenu, il est possible de déplacer les atomes manuellement dans la structure 3D résultante et d'optimiser la structure à nouveau. Dans tous les cas, il est recommandé de répondre « non » lorsque l'on vous demande si vous souhaitez ôter les hydrogènes avant de commencer l'optimisation dans la boîte de dialogue **3D Structure Optimization** qui apparaît.

Si vous souhaitez effectuer une analyse conformationnelle réelle de votre molécule en utilisant une mécanique moléculaire particulière ou un logiciel d'optimisation géométrique de chimie quantique, la structure optimisée 3D ChemSketch peut servir de donnée de départ.

Remarque ACD/ ChemSketch peut optimiser des structures contenant des atomes de l'hydrogène au xénon avec un état de valence standard et des états de liaison.

Si vous utilisez les liaisons stéréo avant et arrière pour la définition de la direction des liaisons, il est conseillé de le faire sur une structure « plane », non optimisée 3D, puis de commencer à nouveau l'optimisation 3D. Notez que les liaisons stéréo des structures 3D peuvent être ambiguës.

Raccourcis :

Barre d'outils Structure :



Clavier :

CTRL + SHIFT + 3

3.12.5 Calcul du point d'ébullition

Cette commande calcule le point d'ébullition (BP), la pression de vapeur (VP), l'enthalpie de vaporisation et le point d'inflammabilité de la structure sélectionnée. Le choix de cette commande fait apparaître la boîte de dialogue **ACD/Boiling Point** avec un schéma illustrant le BP ou VP calculé.

Note Ce module peut être acheté en complément de ChemSketch.

Pour plus de détails sur les options de la boîte de dialogue **Boiling Point**, reportez-vous au *Guide de l'utilisateur ACD/Boiling Point*.

Raccourcis :

Barre d'outils Structure :



Clavier :

CTRL + SHIFT + B

3.12.6 Ciseaux MassSpec

Cette commande calcule et affiche la masse mono isotopique de plusieurs des fragments d'une structure. Sélectionnez la ou les liaisons liant les fragments dont vous souhaitez calculer la masse mono isotopique, et choisissez cette commande ou cliquez sur **MassSpec Scissors** . Les valeurs de masse mono isotopique apparaîtront au-dessous des fragments.

Note Pour calculer les valeurs de masse nominale et de masse moyenne d'un fragment de structure, sélectionnez-le puis choisissez la commande correspondante dans la liste **Calculate** (Menu **Outils**).

Si vous sélectionnez 3 liaisons adjointes ou plus simultanément, un message d'avertissement apparaît, vous informant que toutes les liaisons sélectionnées seront brisées en conséquence de cette opération, et qu'il semblera qu'une partie de molécule ou la molécule entière aura été sélectionnée accidentellement. Cliquez sur **Yes** si vous souhaitez néanmoins poursuivre le processus, ou sur **No** si vous souhaitez l'annuler.

Raccourci :

Barre d'outils Structure :



3.12.7 Afficher l'aromaticité

Cette commande transforme les liaisons doubles conjuguées en liaisons doubles délocalisées en anneaux aromatiques dans la/les structure(s) ou fragment(s) sélectionné(s). Si aucune sélection n'est faite, les anneaux aromatiques s'afficheront dans toutes les structures dessinées sur la page en cours.

Note Pour ôter des anneaux aromatiques, utilisez la commande **Hide Aromaticity** dans le menu **Outils**.

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + A

3.12.8 Masquer l'aromaticité

Cette commande transforme les liaisons doubles délocalisées en anneaux aromatiques dans les liaisons doubles conjuguées de toutes les structures de la page en cours, ou dans la ou les structure(s) ou fragment(s) sélectionné(s).

Note Pour afficher des cercles aromatiques, utilisez la commande **Show Aromaticity** dans le menu **Outils**.

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + H

3.12.9 Développer les formules abrégées

Cette commande développe une étiquette basée sur les formules abrégées insérées à l'aide de l'outil **Edit**

Atom Label  (pour plus d'informations, reportez-vous à la section 3.7.4). Sélectionnez l'étiquette que vous souhaitez développer et choisissez cette commande. Si aucune structure ou fragment n'est sélectionné, cette commande agit sur toutes les structures dessinées sur la page en cours.

Les symboles suivants sont acceptables pour cet outil:

- '~' (tilde)— charge négative;
- '+' (plus)— charge positive;
- '-' (minus)—liaison simple (peut être omis);
- '=' (signe égal)—liaison double;
- '%' (pourcentage)—liaison triple;
- '(' (parenthèses)—recouvre un groupe d'atomes.

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + F

3.12.10 Ajouter des hydrogènes explicites

Cette commande ajoute des hydrogènes explicites au fragment ou à la structure sélectionné. Si rien n'est sélectionné dans l'espace de travail, les hydrogènes explicites sont ajoutés à toutes les structures dessinées sur la page en cours.

Pour supprimer des hydrogènes explicites, dans le menu **Outils**, choisir **Remove Explicit Hydrogens**.

Note Si vous choisissez d'optimiser la structure à hydrogènes explicites en 3D, il vous est demandé si vous souhaitez supprimer des hydrogènes explicites avant l'optimisation 3D. Même si vous choisissez **Yes**, il est possible que les hydrogènes apparaissent dans la structure 3D optimisée si l'option **Add Hydrogens** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée. Pour plus d'informations, voir la Section 3.14.1.2.

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + Y

3.12.11 Supprimer des hydrogènes explicites

Cette commande masque les hydrogènes explicites dans le fragment ou la structure sélectionné. Si aucune structure ou fragment n'est sélectionné, les hydrogènes explicites seront ôtés de toutes les structures dessinées sur la page en cours.

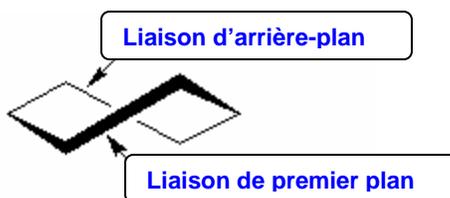
Pour ajouter des hydrogènes explicites, dans le menu **Outils**, choisissez **Add Explicit Hydrogens** (pour plus d'informations, reportez-vous à la Section 3.12.10).

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + R

3.12.12 Amener liaison(s) vers l'avant

Cette commande vous permet de faire passer la liaison d'arrière-plan sélectionnée au premier plan. Sélectionnez la liaison et choisissez cette commande.

Si, dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**), la case **Enable Bond Intersections** est sélectionnée, ACD/ChemSketch casse automatiquement la liaison située derrière la nouvelle liaison dessinée. La liaison cassée est considérée comme liaison d'arrière-plan et la liaison entière est considérée comme étant au premier plan.



Astuce Il est également possible d'amener des liaisons d'arrière-plan au premier plan en utilisant l'outil **Change Position**  (reportez-vous à la Section 3.6.20).

Raccourci clavier : CTRL + F

3.12.13 Envoyer liaison(s) vers l'arrière-plan

Cette commande déplace la ou les liaisons de premier plan sélectionnées vers l'arrière-plan (voir les explications de la Section précédente).

Astuce Il est possible d'envoyer des liaisons de premier plan vers l'arrière-plan en utilisant l'outil **Change Position**  (pour plus d'informations, voir la Section 3.6.20).

Raccourci clavier : CTRL + K

3.12.14 Renumérotation automatique

Cette commande numérote automatiquement les atomes de la structure ou du fragment sélectionné. Si aucune structure ou fragment n'est sélectionné dans l'espace de travail, tous les atomes dessinés à cet instant dans l'espace de travail sont numérotés.

Note Pour éditer la numérotation atomique, utilisez les outils **Numérotation Manuelle**  ou **Propriétés Chimiques Atomiques**  (pour plus d'informations, voir les Sections 3.7.8 et 3.7.7 respectivement). Pour modifier le style (taille de police, couleur, etc.) des numéros d'atome, utilisez le panneau **Propriétés** (voir la Section 3.12.1).

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + N

3.12.15 Supprimer la numérotation

Cette commande permet de supprimer la numérotation atomique de la structure ou du fragment sélectionné. Si aucune structure ou fragment n'est sélectionné dans l'espace de travail, la numérotation atomique sera supprimée de toutes les structures dessinées dans l'espace de travail.

Note Pour insérer ou éditer la numérotation atomique, utilisez la commande **Renumérotation Automatique** (voir la Section 3.6.14) ou les outils **Numérotation Manuelle**  et **Propriétés Chimiques Atomiques**  (pour plus d'informations, voir les Sections 3.7.8 et 3.7.7 respectivement). Pour modifier le style (taille de police, couleur, etc.) des numéros d'atome, utilisez le panneau **Propriétés** (voir la Section 3.12.1).

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + L

3.12.16 Générer > Nom de Structure

Cette commande permet de générer un ou des nom(s) à partir de la ou des structure(s) dessinée(s). Notez que cette commande est disponible dans le mode Structure aussi bien que dans le mode Dessin. Pour obtenir un nom pour une structure, sélectionnez-la et choisissez cette commande. Le nom généré sera inséré sous la structure en tant que texte. Pour générer des noms pour un mélange, sélectionnez les structures souhaitées et choisissez cette commande. Le nom de mélange généré apparaîtra sous la structure la plus basse en tant que texte sur une seule ligne.

Note Si une seule structure est dessinée ou si vous souhaitez générer un nom pour toutes les structures dessinées dans l'espace de travail, vous n'avez pas à sélectionner les structures.

ACD/ Name Freeware est distribué en tant que complément gratuit à ChemSketch. Il contient les restrictions suivantes par rapport à la version commercialisée : les structures à nommer ne peuvent contenir plus de 50 atomes (H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na, ou K) ni plus de 3 cycles dans chaque partie polycyclique.

Pour plus d'informations sur la version commercialisée du logiciel ACD/Name, rendez-vous sur notre site Web : http://www.acdlabs.com/products/name_lab/name/.

Raccourcis :

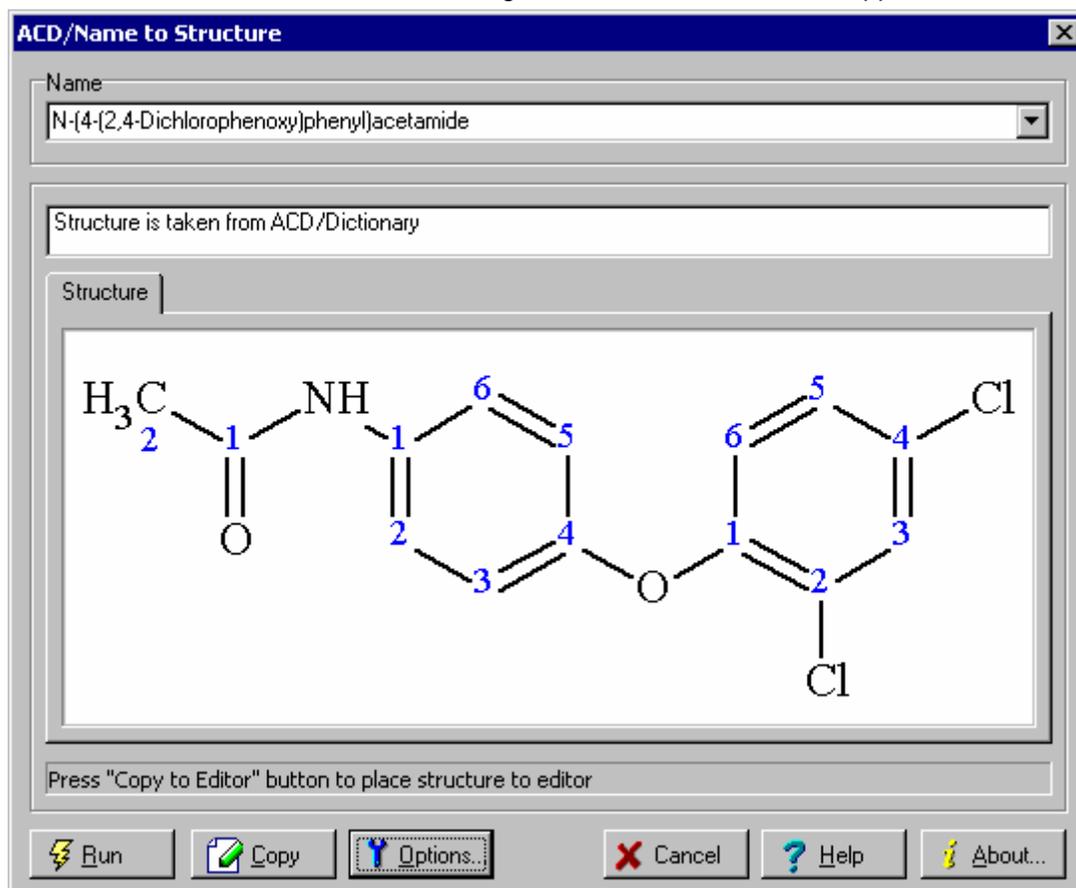
Clavier : CTRL + SHIFT + I

Barre d'outils générale : 

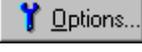
3.12.17 Générer > une structure à partir d'un nom

Cette commande démarre le module ACD/Nom de Structure qui génère des structures à partir des noms chimiques systématiques créés selon les recommandations de l'Union Internationale de la Chimie Pure et Appliquée (IUPAC) sur la Nomenclature de la Chimie Organique, et des recommandations du Chemical Abstract Service (CAS) sur les noms inversés, les noms triviaux et commerciaux, les numéros de registre et les abréviations. Notez que le module ACD/Nom de Structure doit être acheté en plus d'ACD/ChemSketch. Pour une description détaillée de la manière de travailler avec ce module, consultez le *Guide de l'utilisateur Nom de Structure ACD* situé dans le dossier de documentation ACD/Labs (\\DOCS\NAMESTR.PDF).

En choisissant cette commande, la boîte de dialogue **ACD/Nom de Structure** apparaît:



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
Name	Dans cette case, spécifiez un nom et cliquez sur Run pour démarrer la génération de structure. Notez que la liste déroulante comprend les noms utilisés précédemment lors d'un processus de génération de structure.
<i>Avertissement(s)</i>	Ce champ affiche les erreurs éventuelles et les messages d'avertissement ayant lieu pendant le processus de génération de structure. Notez qu'il est possible que le système génère la structure optimale en dépit des messages d'avertissement.
<i>Structure</i>	Affiche la structure générée. Si le système génère plusieurs structures à partir d'un nom (par exemple, acide pentanéedithioïque), les structures sont placées dans des onglets séparés. Pour visualiser la structure, cliquez sur l'onglet correspondant.
 Run	Démarré le processus de génération de structure à partir du nom spécifié dans la case Nom .
 Copy	Place la structure générée dans la fenêtre ChemSketch.
 Options...	Affiche la boîte de dialogue Options de Nom de Structure ACD dans laquelle vous pouvez définir des préférences pour le processus de génération de structure (pour plus d'informations, voir la Section Error! Reference source not found.).
 About...	Affiche les informations concernant la version actuelle du programme et l'entreprise productrice.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + SHIFT + G

Barre d'outils générale : 

3.12.17.1 Boîte de dialogue Options de Nom de structure ACD

La boîte de dialogue **Options de Nom de Structure ACD** vous permet de spécifier les options de génération de structure. Pour l'afficher, cliquez sur **Options**  dans la boîte de dialogue **Nom de Structure ACD**.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
Numérotation	<p>Si la case Show Numbering in Dialog est sélectionnée, la numérotation atomique sera affichée dans la boîte de dialogue Nom de Structure ACD.</p> <p>Si la case Copy to Editor with Numbering est sélectionnée la numérotation atomique sera affichée sur la structure au cas où elle soit placée dans la page ChemSketch.</p> <p>Notez que si la structure générée provient du Dictionnaire ACD, la numérotation ne sera pas affichée, quelles que soient les options sélectionnées.</p>
Avertissements	<p>Si l'option Ignore Warnings est sélectionnée, le programme générera une ou des structures sans afficher d'avertissement.</p> <p>Si l'option Report Warnings est sélectionnée, la ou les structures générées seront affichées ensemble avec des avertissements sur leur fiabilité.</p> <p>Sélectionnez l'option Stop on Warnings pour interrompre le processus de génération de structure si un problème apparaît. En conséquence, les avertissements correspondants s'afficheront, et aucune structure ne sera affichée.</p> <p>Si la structure se trouve dans le Dictionnaire ACD, elle est affichée avec l'avertissement correspondant.</p>
Marquer les liaisons stéréo doubles indéfinies	<p>Si cette case est sélectionnée, le programme générera des structures avec des liaisons stéréo doubles indéfinies à partir des noms qui ne contiennent pas les informations sur la configuration des liaisons doubles.</p>
Rechercher dans le Dictionnaire ACD	<p>Si cette case est sélectionnée le système recherchera le nom spécifié dans le Dictionnaire ACD.</p>
Vérifier la notation SMILES	<p>Si cette case est sélectionnée, le programme vérifiera si le nom saisi correspond à la notation SMILES. Si c'est le cas, la structure sera générée.</p>
Vérifier la notation InChI	<p>Si cette case est sélectionnée, le programme vérifiera si le nom saisi correspond à la notation InChI. Si c'est le cas, la structure sera générée.</p>

3.12.18 Générer > Descripteurs stéréochimiques

Cette commande vous permet de générer des descripteurs stéréo pour les liaisons doubles, les centres chiraux et pseudo chiraux. Cette commande est disponible dans les modes Structure et Dessin.

Pour générer des descripteurs stéréo, sélectionnez une structure ou un ensemble de structures et choisissez cette commande. Les descripteurs stéréo apparaissent sur la ou les structures sélectionnées près du centre chiral ou de la liaison double correspondants.

Note Si aucune structure n'est sélectionnée dans l'espace de travail, les descripteurs stéréo sont automatiquement générés pour toutes les structures de la page en cours qui ont des centres stéréo ou des liaisons doubles pour lesquels les isoméries Z/E ou R/S sont possibles.

S et **R** décrivent une configuration à centre chiral.

E et **Z** décrivent une configuration à liaison double.

Petit **r** et **s** décrivent des configurations à centres pseudo chiraux.

Lorsqu'il génère des descripteurs stéréo de structures optimisées 3D, le programme prend en compte les coordonnées en cours X, Y et Z, et ignore les liaisons stéréos.

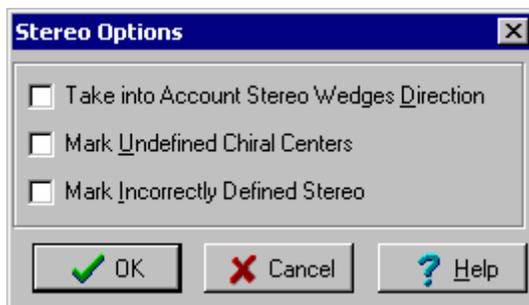
Lorsqu'il génère des descripteurs stéréo, le programme ignore la direction de la liaison qui dépend uniquement de la configuration du dessin (qu'il soit dirigé vers le haut ou vers le bas). Toutefois, il fait une différence entre les liaisons **Stéréo Avant** et **Arrière**.

Note Pour changer la couleur des descripteurs stéréo, dans le menu **Options** choisissez **Préférences**. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, cliquez sur l'onglet **Structure** puis sélectionnez la couleur souhaitée dans la case **Numérotation Manuelle/Auto**.

Pour générer des descripteurs stéréo spéciaux pour les centres potentiels, et des avertissements stéréo concernant les configurations stéréo incorrectement définies, sélectionnez une structure ou un ensemble de structures, spécifiez des options dans la boîte de dialogue **Options de Descripteurs Stéréo**, et choisissez cette commande. Après la génération, les centres chiraux potentiels seront marqués d'une astérisque (*), et les atomes à la configuration stéréo incorrectement définie seront marqués d'un point d'interrogation (?).

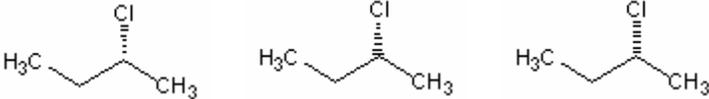
3.12.19 Générer Options de Descripteurs stéréochimiques- **Nouveauté 10.0 !**

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Options Stéréo**, qui vous permet de spécifier des options pour la génération de descripteurs avertissements spéciaux concernant des définitions de configuration stéréo manquées ou ambiguës. Cette option vous permet de contrôler la qualité des schémas de structures chimiques et d'éviter des erreurs dans la représentation de structures et le calcul de données.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
Prendre en compte la	Si cette case est sélectionnée, les faisceaux « haut » et « bas » qui indiquent

Option	Description
direction des faisceaux stéréo	<p>les centres stéréo seront analysés selon leur direction (selon l'atome auquel l'extrémité étroite est attachée).</p> <p>Si cette case n'est pas sélectionnée, le signe (« haut » ou « bas ») du faisceau stéréo ne dépend pas de la direction.</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p><i>Si cette case est sélectionnée:</i> (2R)-2-chlorobutane (2S)-2-chlorobutane (2R)-2-chlorobutane</p> <p><i>Si cette case n'est pas sélectionnée:</i> (2R)-2-chlorobutane (2R)-2-chlorobutane (2R)-2-chlorobutane -</p>
Marquer les centres chiraux indéfinis	Sélectionnez cette case pour générer des descripteurs stéréo pour les centres chiraux potentiels. Ces centres seront marqués d'une astérisque (*).
Marquer les stéréo incorrectement définis	Sélectionnez cette case pour générer des descripteurs d'avertissement spéciaux pour marquer les atomes dont la configuration stéréo est incorrectement définie. Ils seront marqués d'un point d'interrogation (?).

3.12.20 Générer > Notation SMILES

Cette commande génère des notations SMILES (Spécification Moléculaire Simplifiée) pour les structures affichées dans la fenêtre ChemSketch. Notez que cette commande est disponible dans les modes Structure et Dessin.

Si aucune des structures affichées n'est sélectionnée, les SMILES apparaîtront pour toutes les structures affichées. Pour générer des SMILES pour la structure définitive, commencez par la sélectionner.

3.12.21 Générer > une structure à partir de SMILES

Cette commande génère une ou des structures à partir de SMILES (Spécification Moléculaire Simplifiée). Notez que cette commande est disponible dans les modes Structure et Dessin.

En choisissant cette commande, la boîte de dialogue **Generate Structure From SMILES** apparaît, et vous pouvez y saisir les SMILES souhaités.

Vous pouvez également générer des structures à partir des lignes SMILES affichées dans la fenêtre ChemSketch (soit générées en utilisant la commande **Generate SMILES Notation**, soit inscrites manuellement en tant que texte). Sélectionnez simplement la ligne de SMILES souhaitée et choisissez cette commande. La structure générée sera placée au-dessous de la ligne SMILES.

3.12.22 Générer > InChI de Structure

Cette commande vous permet de générer la notation InChI d'une structure dessinée.

L'Identification Chimique Internationale de l'IUPAC (InChI™) est une identification non brevetée permettant une identification non ambiguë des substances chimiques pour la manipulation électronique et digitale des informations structurales chimiques.

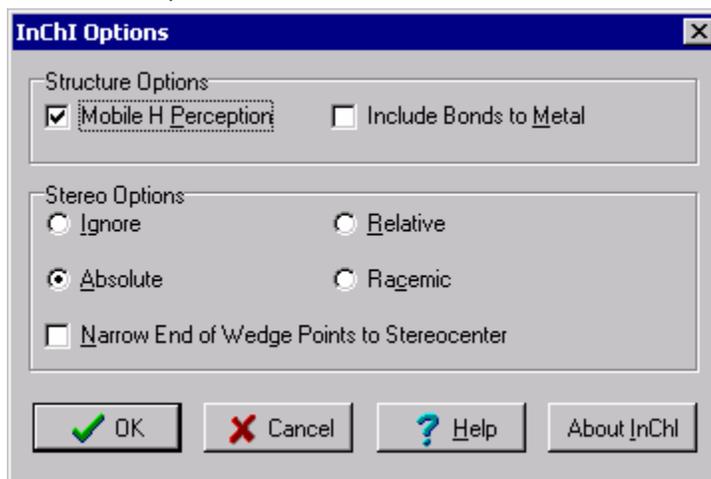
Une étiquette InChI est générée en convertissant une structure chimique donnée (sous la forme d'un 'tableau de connexion') en un ensemble unique et prévisible de caractéristiques ASCII. La notation InChI est une manière de représenter des composés chimiques sans dépendre de la façon dont ils sont dessinés.

Les procédures InChI ont été développées dans le cadre d'un projet IUPAC pendant la période 2000–2004. Le développement technique a principalement été effectué à l'Institut National des Normes et de la Technologie américain (NIST).

Vous trouverez davantage d'informations sur InChI sur le site web IUPAC : www.iupac.org/inchi.

3.12.23 Générer > Options InChI

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Options InChI**, qui vous permet de spécifier des préférences pour la génération d'étiquettes InChI.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
Perception H Mobile	Cette option vous permet de définir si la tautomérie possible doit ou non être prise en compte. Désélectionnez cette case pour inclure des informations concernant le tautomère spécifique dans la notation InChI.
Inclure Liaisons au Métal	Si cette case est sélectionnée, la notation InChI prendra en compte les informations sur les liaisons entre le métal et d'autres atomes; sinon, elles seront ignorées.
Options Stéréo	Cette option vous permet de choisir de prendre ou non en compte les configurations stéréo de la structure dessinée, ainsi que la manière de les traiter. Vous pouvez choisir entre les options Ignorer , Absolu , Relatif indiquées dans la section correspondante de la notation InChI générée.
Extrémité étroite des points du faisceau vers le centre stéréo	Cette option définit la façon de traiter les liaisons stéréo reliant deux centres stéréo. Si la case est désélectionnée, la procédure traite ces liaisons stéréo comme appartenant aux deux centres stéréo et ayant la même signification pour les deux. Si la case est sélectionnée, seule une extrémité étroite sera prise en compte, et un seul centre stéréo sera défini dans la notation InChI générée.

3.12.24 Générer > Structure à partir de InChI

Cette commande vous permet de générer une structure à partir d'une notation InChI (International Chemical Identifier IUPAC). Vous pouvez utiliser cette option dans le mode Structure aussi bien que le mode Dessin:

Dans le mode Structure; choisissez cette commande, puis dans la boîte de dialogue **Generate Structure from InChI** qui apparaît, saisissez la notation InChI et cliquez sur **OK**. Le contour de la structure générée est attaché à votre curseur, et vous devez simplement cliquer pour la placer dans l'espace de travail. Notez que vous pouvez retourner l'ombre de la structure shadow en appuyant sur TAB.

Dans le mode Dessin; saisissez la notation InChI dans la case texte, puis choisissez cette commande. La structure générée apparaît sur la page ChemSketch.

Vous trouverez davantage d'informations sur InChI sur le site web IUPAC : www.iupac.org/inchi.

3.12.25 Rechercher une structure - *Version commerciale uniquement !*

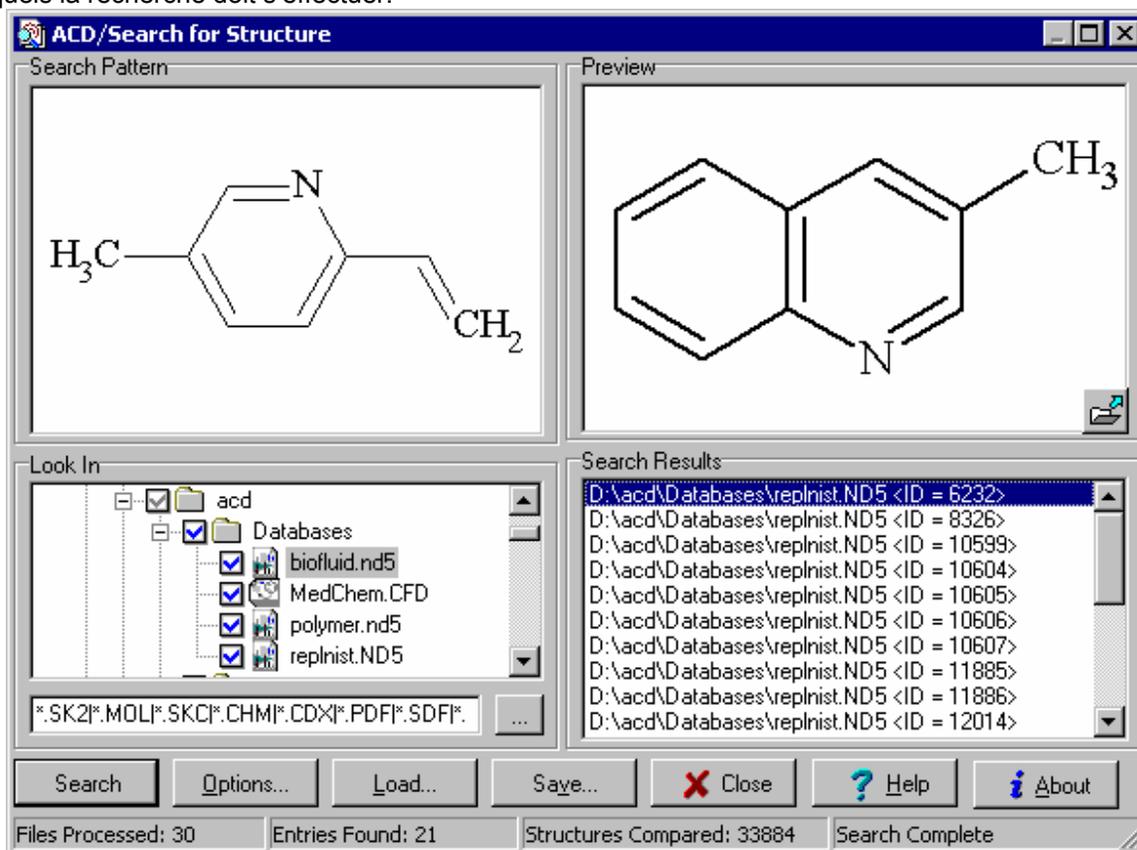
Cette commande démarre le module Recherche de Structure ACD qui vous permet de rechercher une ou des structures chimiques dessinées dans une multitude de fichiers sans les ouvrir. Cette fonction est compatible avec les formats suivants :

- Document ACD/ChemSketch (.SK2)
- MDL Fichier mol (.MOL)
- Fichier SD MDL (.SDF)
- ISIS/Sketch Fichier BIN (.SKC)
- Fichier CHM CambridgeSoft ChemDraw (.CHM)
- Fichier CDX CambridgeSoft ChemDraw (.CDX)
- Adobe Acrobat (.PDF) (créé avec le logiciel ACD/Labs)
- Fichier rxn REACCS (.RXN)
- Document Microsoft Word (.DOC)
- Document Microsoft Excel (.XLS)
- Document Microsoft PowerPoint (.PPT)
- Base de données ACD/Spec (.NDB ; .ND5 ; ND8)
- Base de données ACD/ChemFolder (.CFD)

- Base de données Utilisateur ACD/CNMR (.CUD)
- Base de données Utilisateur ACD/HNMR (.HUD)
- Base de données ACD/XNMR (.XDB)
- Base de données Utilisateur ACD/PhysChem (.PCD ; .LUD ;.LU8 ;.PUD ;.SUD)
- Base de données ACD/ChromGenius (.CGB)
- Base de données Interne ACD/NMR Predictor (*NMR?.INT)
- Base de données Interne ACD/LogP (LOGP.INT)
- Base de données Interne ACD/pK_a (PKA.INT)
- Base de données Interne ACD/Solubility DB (SOL?.INT)

Lorsque la structure est trouvée, elle peut être visualisée et placée dans la fenêtre ChemSketch ou dans d'autres applications.

Dessinez le fragment ou la structure que vous souhaitez trouver et choisissez cette commande, ou cliquez sur le bouton correspondant  dans la barre d'outils Générale. Dans la fenêtre **Rechercher une Structure** qui apparaît, vous pouvez indiquer des préférences de recherche et définir les dossiers dans lesquels la recherche doit s'effectuer.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
Search Pattern	Affiche la ou les structure(s) à rechercher dans les fichiers indiqués dans la zone Look In .
Look In	Sélectionnez les cases des dossiers dans lesquels vous souhaitez effectuer la recherche. Si vous sélectionnez une case correspondant à un lecteur, la recherche s'effectuera dans tous les dossiers de ce lecteur.

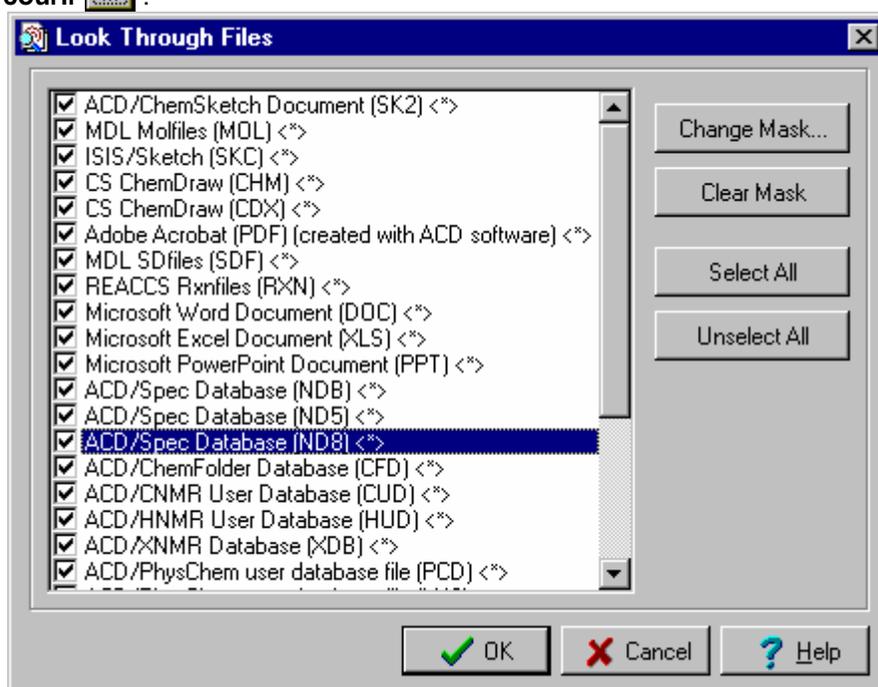
Option	Description
	Dans cette case, vous pouvez indiquer le masque des fichiers dans lesquels effectuer la recherche. Vous pouvez le saisir manuellement ou cliquez sur le bouton sur la droite de la case. Dans la boîte de dialogue Look Through Files qui apparaît, choisissez les formats à inclure dans la recherche et définissez le masque de fichier. Pour plus de détails sur les options de cette boîte de dialogue, voir la Section Error! Reference source not found.
Apperçu	Affiche la structure trouvée après votre requête dans le fichier actuellement en surbrillance dans la liste Résultats de Recherche (seulement la structure, et non la page entière ou le document entier). Cliquez sur  pour afficher la structure dans ACD/ChemSketch ou dans l'application spécifiée dans la boîte de dialogue Options de Recherche (onglet Open).
Résultats de Recherche	Cette zone affiche la liste des fichiers dans lesquels la structure recherchée a été trouvée. Vous pouvez double cliquer sur l'un de ces fichiers dans la liste pour l'ouvrir dans ACD/ChemSketch ou dans une autre application sélectionnée (selon l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue Options de Recherche , onglet Open).
	Démarre la recherche. Lorsque vous lancez la recherche, le bouton Search se transforme en bouton Stop  , ce qui vous permet d'interrompre le processus de recherche et d'afficher les résultats de recherche obtenus jusqu'à maintenant.
	Affiche la boîte de dialogue Options de Recherche dans laquelle vous pouvez spécifier les conditions de recherche (pour plus d'informations, voir les Sections Error! Reference source not found. – Error! Reference source not found.).
	Affiche la boîte de dialogue Load Search Results dans laquelle vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement d'un fichier .SSF enregistré précédemment et contenant des paramètres de recherche.
	Affiche la boîte de dialogue Save Search dans laquelle vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement d'un fichier .SSF (Search for Structure Files format). Le fichier enregistré inclura la ou les structure(s) à rechercher, le dossier et les paramètres de masque de fichier, ainsi que les résultats de recherche (s'il y en a).
Barre d'Etat	Files Processed —indique le nombre de fichiers parcourus jusqu'à maintenant. Entries Found — indique le nombre de structures trouvées jusqu'à maintenant. Structures Compared — reflète le nombre de structures par rapport au motif de recherche jusqu'à maintenant. Reflète l'emplacement de recherche actuel pendant la recherche, ou l'état d'avancement de l'action correspondante while searching or state on completion of the corresponding action: <i>Recherche terminée</i> , <i>Recherche restaurée</i> , ou <i>Recherche enregistrée</i> .
	Ferme la fenêtre en cours. Avant de fermer la fenêtre Recherche de Structure ACD, le programme vous invite à sauvegarder les changements apportés aux paramètres de recherche.
	Affiche des informations sur votre version de Recherche de Structure ACD, notamment le numéro de version, le droit de reproduction, et les informations concernant l'enregistrement utilisateur.

Si des résultats sont affichés dans la case **Search Results**, et que vous souhaitez lancer une nouvelle recherche, un message apparaît et vous demande si vous souhaitez ou non lancer une nouvelle recherche.

Raccourcis :Clavier :  CTRL + SHIFT + CBarre d'outils générale : **3.12.25.1 Boîte de Dialogue Regarder dans les fichiers**

Dans cette boîte de dialogue, vous pouvez sélectionner les formats des fichiers à parcourir et définir le masque de fichier pour chaque format.

Pour afficher cette boîte de dialogue, dans la case **Look In** de la fenêtre Recherche de Structure ACD, cliquez sur **Parcourir** .



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Liste de Formats	Affiche les formats (avec le masque spécifié entre crochets brisés) compatibles avec le module de Recherche de Structure ACD. Pour ajouter les formats à la liste de fichiers à parcourir, sélectionnez les cases correspondantes. Pour définir le masque pour un format spécifique, cliquez sur le format dans la liste pour le mettre en surbrillance et cliquez sur Change Mask .
	Sélectionnez le format pour lequel vous voulez définir un masque, puis cliquez sur ce bouton pour afficher la boîte de dialogue Change File Mask . Dans les fichiers au format affiché en surbrillance, limitez votre recherche à certains fichiers en saisissant leur(s) masque(s) (par exemple, but* pour rechercher uniquement les fichiers dont le nom commence par « but »). Vous pouvez entrer plusieurs masques, en les séparant par une virgule. Notez que vous ne devez pas saisir d'extensions car vous ne pouvez changer le masque que d'un format en surbrillance.
	Cliquez sur ce bouton pour effacer les masques définis pour la recherche dans les fichiers au format affiché en surbrillance. Dans ce cas, tous les fichiers dont le format correspond seront parcourus.

Option	Description
Select All	Cliquez sur ce bouton pour sélectionner tous les formats de fichiers dans la liste. Dans ce cas, les fichiers de tous types seront parcourus. Les masques spécifiés pour les formats seront pris en compte.
Unselect All	Cliquez sur ce bouton pour désélectionner toutes les cases.

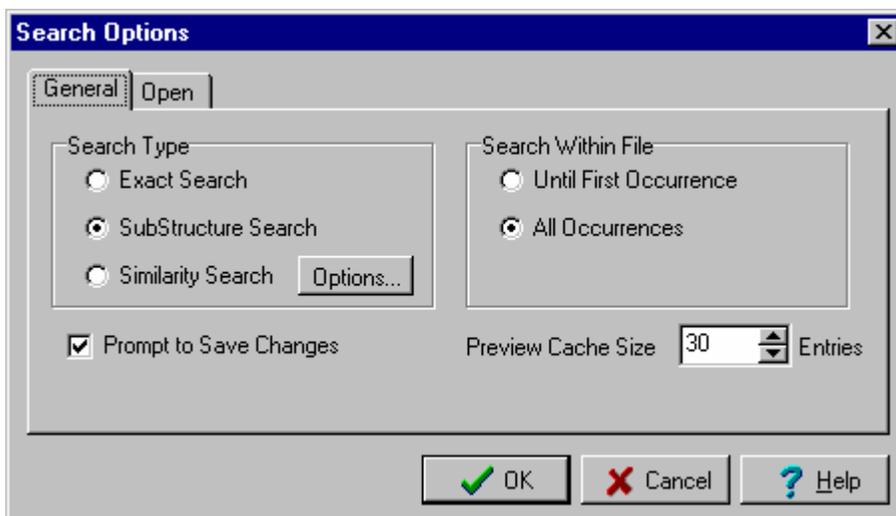
Note Pour le format PDF, vous ne pouvez parcourir que les fichiers créés avec ACD/ChemSketch. Tous les autres fichiers seront ignorés.

3.12.25.2 Boîte de Dialogue Options de Recherche : Onglet Général – Version commerciale uniquement !

Dans cette boîte de dialogue, vous pouvez définir des options de recherche.

Pour afficher cette boîte de dialogue, dans la fenêtre **Recherche de Structure ACD**, cliquez sur **Options**

 (pour plus d'informations, voir la section 3.12.25).



L'onglet **Général** contient les options suivantes :

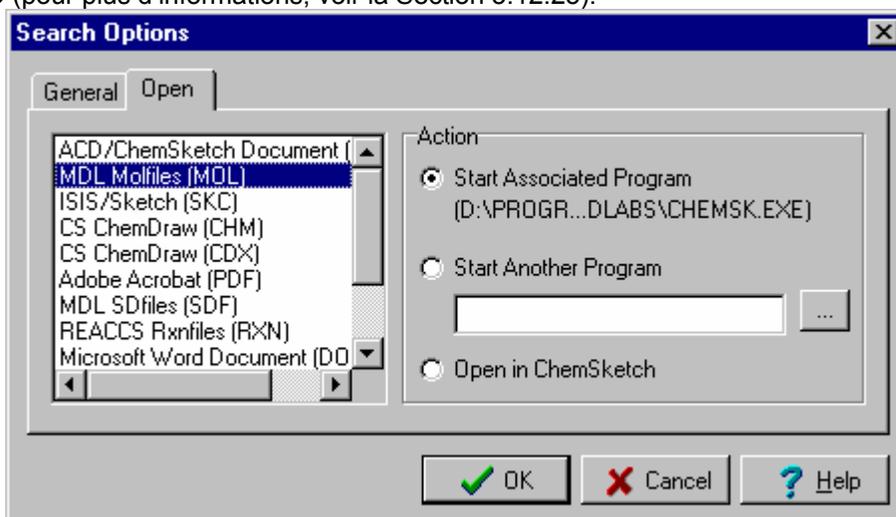
Option	Description
Recherche Exacte	Si cette option est sélectionnée, la recherche de la présence du modèle de recherche comme structure indépendante sera effectuée dans les fichiers spécifiés.
Recherche Substructure	Si cette option est sélectionnée, le programme considère la ou les structures actuellement affichées comme substructures et recherche toutes les structures contenant la ou les structures comme leur fragment structurel. Notez que vous pouvez utiliser les outils Atome d'interrogation et Liaison d'interrogation pour définir la structure à rechercher (pour plus d'informations, voir les Sections 3.7.1-3.7.2).
Recherche par Affinité	Si cette option est sélectionnée, la recherche de structures similaires à celle affichée dans la case Modèle de Recherche de la fenêtre Recherche de Structure ACD s'effectuera dans les fichiers spécifiés. Les options d'affinités de structures peuvent être spécifiées en cliquant sur Options ; vous pouvez y choisir entre les coefficients d'affinité suivants : Tanimoto Dice Cosine Based on Hamming Distance Based on Euclidean Distance Pour plus d'informations sur ces coefficients, voir la Section 3.12.25.4.

Option	Description
Sauvegarder les Changements	Si cette case est sélectionnée, chaque fois que vous fermez la fenêtre Recherche de Structure ACD, le programme vous invite à sauvegarder les résultats de recherche dans un fichier .SSF si vous ne l'avez pas déjà fait.
Rechercher dans un Fichier	Si vous sélectionnez l'option Until First Occurrence , le programme interrompra la recherche dans un fichier spécifique dès qu'au moins une entrée correspondante sera trouvée dans ce fichier, puis le programme lancera la recherche dans le fichier suivant. Si l'option All Occurrences est sélectionnée, le programme cherchera toutes les occurrences de la structure recherchée dans chaque fichier et affichera chaque entrée trouvée comme une ligne séparée dans la liste Résultats de Recherche .
Apperçu de la Taille du Cache	Pour accélérer l'affichage des entrées trouvées, les pages affichées en dernier dans la zone Preview sont stockées comme fichier caché, et si plus tard vous visualisez la même page, son affichage proviendra du fichier caché. Dans cette case vous pouvez spécifier le nombre de pages à stocker comme fichier caché.

3.12.25.3 Boîte de Dialogue Options de Recherche : Onglet Ouvrir – Version commerciale uniquement !

Dans cette boîte de dialogue vous pouvez définir les préférences de recherche.

Pour afficher cette boîte de dialogue, cliquez sur **Options** dans la fenêtre Recherche de Structure ACD (pour plus d'informations, voir la Section 3.12.25).



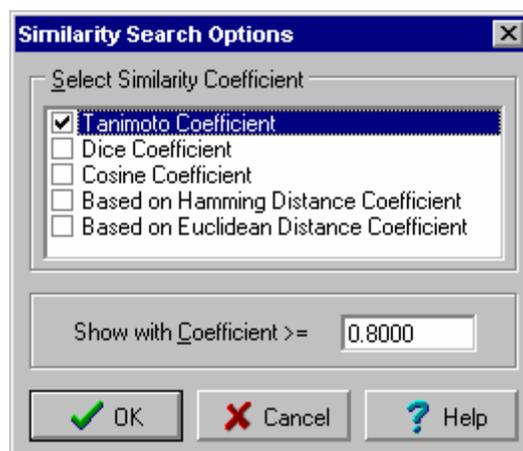
L'onglet **Open** contient les options suivantes :

Option	Description
<i>Liste de Formats</i>	Affiche les formats de fichier actuellement compatibles avec ACD/ChemSketch. En cliquant sur l'un des formats de la liste, la zone Action est modifiée afin de présenter le programme avec lequel les fichiers trouvés s'ouvriront.
Action	Dans cette zone, spécifiez quel programme doit être utilisé pour ouvrir les fichiers au format sélectionné : Si l'option Start Associated Program est sélectionnée, les fichiers au format sélectionné seront ouverts par le programme actuellement associé à ce format dans le système Windows. Si l'option Start Another Program est sélectionnée, vous pouvez spécifier le programme (fichier EXE) devant être utilisé pour ouvrir les fichiers correspondants (ceci n'affecte en rien les paramètres d'enregistrement de fichier Windows). Si l'option Open in ChemSketch est sélectionnée, la structure trouvée sera placée dans l'espace de travail de la fenêtre ChemSketch.

3.12.25.4 Boîte de Dialogue Options de recherche par affinité – **Version Commerciale uniquement!**

Cette boîte de dialogue permet de spécifier les paramètres pour la recherche de structures selon une structure similaire à une structure cible (actuellement affichée dans la fenêtre ChemSketch).

Cette boîte de dialogue apparaît en cliquant sur **Options** dans la boîte de dialogue **Options de Recherche**.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Sélectionnez Coefficient d'affinité	Affiche la liste des coefficients d'affinité qui peuvent être appliqués pendant la recherche par affinité. Pour appliquer le coefficient souhaité, sélectionnez la case correspondante.
Afficher avec le Coefficient >=	Dans cette case, spécifiez le coefficient d'affinité qui servira de filtre pour les structures recherchées. Au cours de la recherche par affinité, le programme génère un coefficient d'affinité pour chaque structure ; les structures dont le coefficient est supérieur ou égal à la valeur spécifiée dans cette case seront affichées comme correspondant à votre recherche.

3.12.26 Calculer > « *Nom de Propriété* » / Toutes les propriétés

Cet ensemble de commandes permet de calculer une ou plusieurs des propriétés de la structure ou du fragment actuellement sélectionné. Les propriétés suivantes sont disponibles :

- Formule moléculaire
- Poids de formule
- Composition
- Réfractivité molaire
- Volume molaire
- Parachore
- Indice de réfraction
- Tension de surface
- Densité
- Constante diélectrique
- Polarisabilité
- Masse mono isotopique, nominale et moyenne

L'annexe B contient des détails supplémentaires sur chaque propriété.

Si vous choisissez une de ces commandes, la propriété correspondante est calculée pour la structure et les données apparaissent dans la fenêtre **Calculation Results**. Pour copier les résultats dans la fenêtre ChemSketch près de la structure, cliquez sur **Copy to Editor**.

Note S'il y a plusieurs structures dessinées dans l'espace de travail et qu'aucune n'est sélectionnée, les propriétés sont calculées pour toutes ces structures (en les considérant comme une structure composite), si cela est possible. S'il est impossible de calculer une propriété, elle sera étiquetée « Indisponible ».

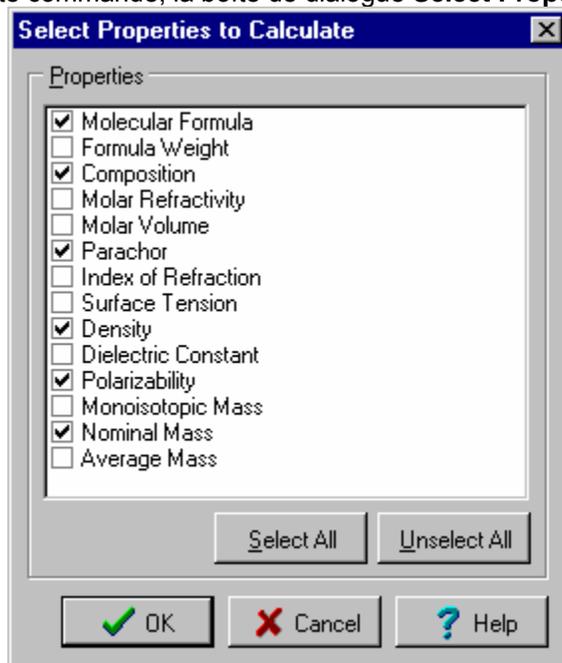
Si vous choisissez la commande **All Properties**, les résultats sont représentés sous la forme d'un ensemble de rangées. Vous pouvez sélectionner les propriétés à placer près de la structure: maintenez CTRL enfoncé et cliquez sur les propriétés désirées pour les sélectionner, puis cliquez sur **Copy to editor**. Cliquez sur **Cancel** pour fermer la boîte de dialogue sans copier les résultats dans l'espace de travail.

Astuce Vous pouvez choisir d'afficher instantanément l'une des propriétés de la structure sélectionnée dans la barre d'état (pour plus d'informations, voir la Section 2.6).

3.12.27 Calculer > Sélectionner les propriétés pour calculer

Cette commande permet de définir les propriétés à calculer quand vous choisissez la commande **Calculate > Selected Properties** dans le menu **Outils**.

Lorsque vous choisissez cette commande, la boîte de dialogue **Select Properties to Calculate** apparaît :



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Propriétés	Liste les propriétés disponibles. Pour définir les propriétés à calculer, sélectionnez les cases adjacentes aux propriétés souhaitées.
<u>S</u> elect All	Sélectionne toutes les propriétés de la liste.
<u>U</u> nselect All	Désélectionne les cases de toutes les propriétés de la liste.

3.12.28 Calculer > Propriétés sélectionnées

Cette commande calcule les propriétés sélectionnées dans la boîte de dialogue **Select Properties to Calculate** (pour plus d'informations, voir les sections précédentes).

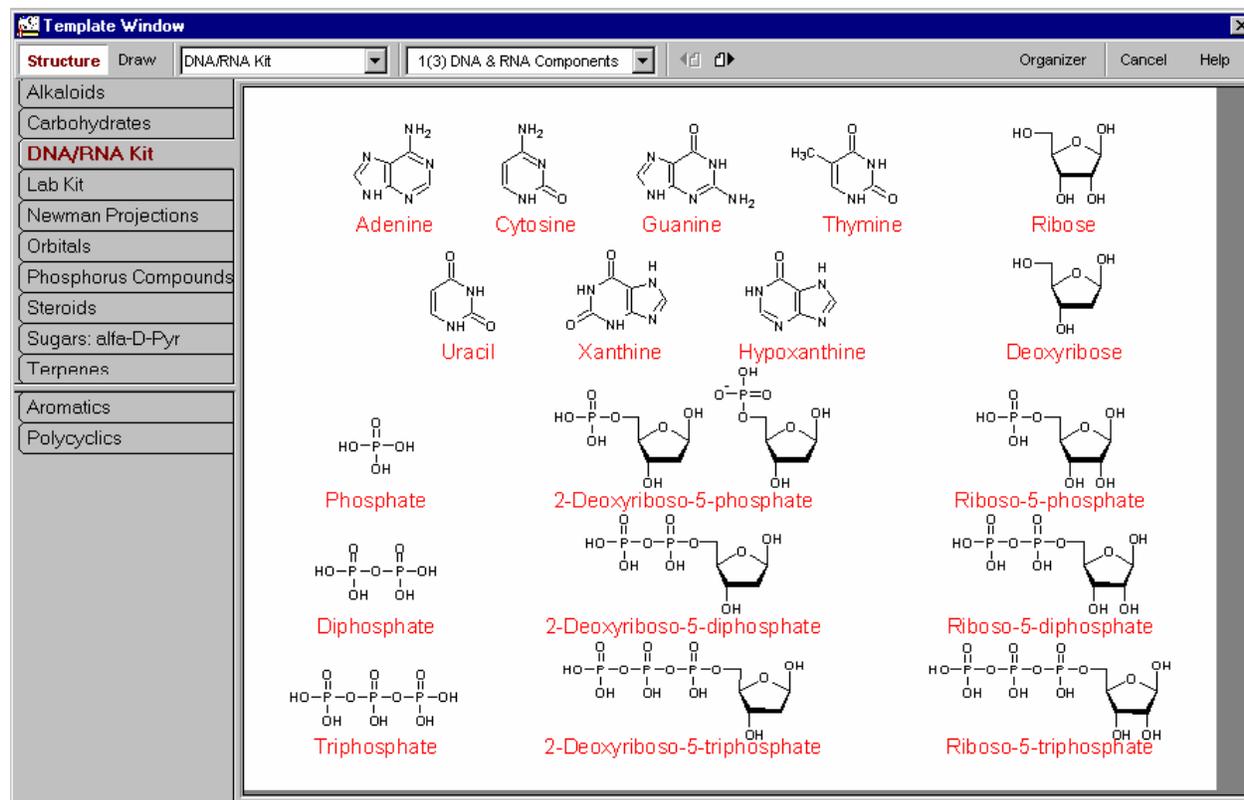
3.13 Menu Modèles

Les commandes de ce menu vous permettent d'insérer des structures standards et des objets graphiques prédéfinis dans votre dessin et/ou de créer vos propres modèles de structures ou d'objets graphiques fréquemment utilisés.

3.13.1 Fenêtre Modèle

Cette commande permet de placer n'importe quelle unité modèle dans la page ChemSketch. Les modèles peuvent contenir des structures et des fragments structurels aussi bien que des objets graphiques.

En choisissant cet commande vous affichez la boîte de dialogue **Template Window** qui vous montre la totalité des modèles disponibles, soit standards (prédéfinis), soit personnalisés (définis par l'utilisateur).

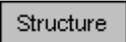


Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Structure Draw	Permet de choisir le mode Structure ou Dessin. Ce mode sera actif lorsque vous placerez le modèle sélectionné dans la page ChemSketch.
Sugars: beta-D-Pyr	Cette liste déroulante contient les modèles listés dans l' Organiseur de modèle (pour plus d'informations, voir la Section 3.13.2). Pour charger un modèle, sélectionnez-le dans la liste.
1(4) Haworth Formulae	Dans cette liste, vous pouvez choisir la page souhaitée à partir d'un modèle multi pages.

Option	Description
	Permet de se déplacer de page en page à l'intérieur du modèle multi pages.
Organizer	Affiche la boîte de dialogue User Template Window Organizer qui permet de gérer les modèles (pour plus d'informations, voir la Section 3.13.2.).
Onglets Modèle	La partie supérieure affiche la liste de modèles « fixes », c'est-à-dire les modèles dont les noms sont affichés dans la boîte de dialogue Template Window à chaque fois que vous l'ouvrez. Vous pouvez spécifier vos propres modèles « fixes » en utilisant la boîte de dialogue User Template Window Organizer (pour plus d'informations, voir la Section 3.13.2). La partie inférieure affiche la liste des modèles récemment choisis dans la liste de modèles disponibles en haut de la fenêtre. Si vous utilisez certains modèles fréquemment et souhaitez qu'ils soient présents dans la boîte de dialogue Template Window chaque fois que vous l'ouvrez, vous pouvez les placer dans la liste « fixe » au-dessus en cochant les noms de modèle dans la boîte de dialogue User Template Window Organizer .
Aperçu	Affiche le contenu du modèle actuellement sélectionné dans la liste.

Pour insérer un modèle :

1. Cliquez sur **Structure**  ou **Dessin**  dans la boîte de dialogue **Template Window** pour indiquer quel mode doit être activé lorsque vous placez les modèles sélectionnés dans la page ChemSketch.

2. Choisissez un modèle dans la rangée d'onglets à gauche, ou dans la liste déroulante en haut. Le contenu du modèle apparaît. S'il y a plus d'une page dans un modèle, vous pouvez vous déplacer de page en page en utilisant  et .

3. Cliquez sur un élément de modèle. Le programme passe immédiatement à la fenêtre ChemSketch dans le mode **Structure** ou **Dessin** (selon le bouton choisi), avec un modèle attaché au curseur. Notez que le contour du modèle est attaché à votre curseur.

Note Si vous avez l'intention d'utiliser le modèle d'une structure chimique pour l'attacher à la structure déjà dessinée, assurez-vous de sélectionner le modèle en cliquant sur l'atome ou la liaison la plus appropriée. Par exemple, si vous souhaitez insérer une structure soudée à une liaison spécifique, sélectionnez le modèle correspondant en cliquant sur la liaison (et non sur l'atome).

4. Cliquez dans l'espace de travail pour coller le modèle copié (notez que si le modèle est une structure ou un fragment, il tente de s'attacher à l'emplacement approprié lorsque vous le déplacez sur l'espace de travail. Cliquez simplement pour le placer au point d'insertion). Chaque fois que vous cliquez, vous placez une copie supplémentaire de l'élément dans l'espace de travail.

5. Pour annuler, choisissez n'importe quel bouton dans la barre d'outils ou faites un clic droit dans l'espace de travail.

Note Vous pouvez renverser l'ombre du modèle en appuyant sur TAB sur le clavier.

Lorsque vous insérez le modèle d'une structure chimique, si vous cliquez sur l'atome de la molécule dessinée en maintenant la touche SHIFT enfoncée, l'atome du modèle remplacera l'atome sur lequel vous cliquez (le modèle sera attaché sans liaison).

Raccourci clavier :

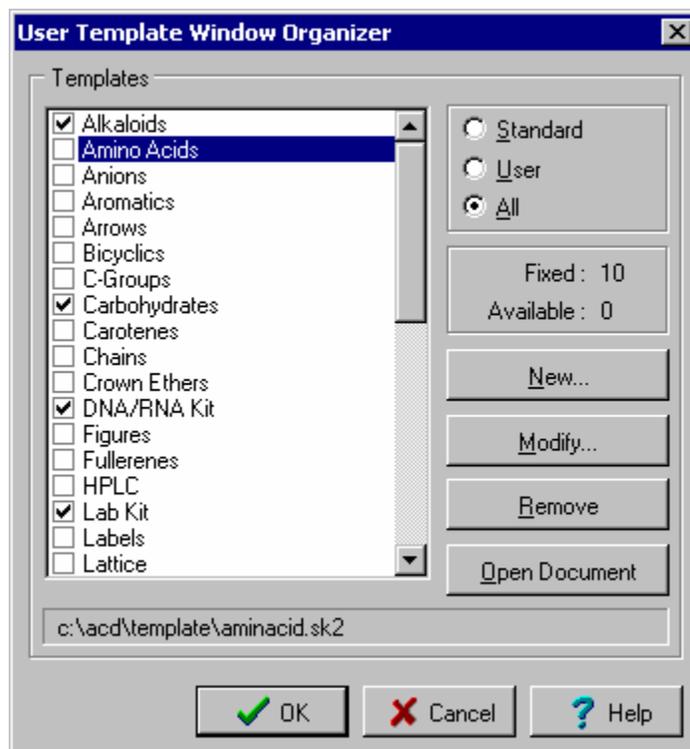
F5

Barre d'outils Générale :



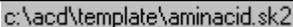
3.13.2 Organiseur de Modèle

Cette commande affiche la boîte de dialogue **User Template Window Organizer** qui permet de gérer les modèles standards (prédéfinis) et personnalisés (définis par l'utilisateur). En utilisant cette boîte de dialogue vous pouvez créer un modèle, modifier le nom du fichier associé à un modèle, et effacer, renommer, et modifier le contenu du modèle.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Templates	Affiche la liste des modèles disponibles. Pour voir la liste de tous les modèles (standards et utilisateur), sélectionnez l'option All . Les cases cochées représentent les modèles inclus dans la liste des modèles « fixes » de la boîte de dialogue Template Window , c'est-à-dire les modèles dont les noms sont affichés dans la boîte de dialogue chaque fois que vous vous y reportez. Notez que seulement dix modèles à la fois peuvent être définis comme « fixes ». Pour intégrer le modèle à la boîte de dialogue Template Window , cliquez sur n'importe quelle case cochée puis cliquez sur la case correspondant au modèle souhaité.
Standard / User / All	Les options de cette case permettent de passer de la liste de modèles Standard (prédéfinis) aux listes User (ajoutés par l'utilisateur), et All (liste entière).
Fixed / Available	Affiche le nombre de modèles placés dans la boîte de dialogue Template Window (Fixed) et le nombre de modèles qui peuvent être placés dans la Fenêtre Modèle (Available). Notez que la boîte de dialogue Template Window peut contenir jusqu'à 10 modèles « fixes » à la fois.
	Affiche la boîte de dialogue Create User Template où vous pouvez choisir le fichier à sauvegarder en tant que modèle utilisateur, et spécifier le nom de modèle. Cliquez sur OK pour que le modèle soit placé dans la liste des Modèles .
	Choisissez le modèle dans la liste et cliquez sur ce bouton pour afficher la boîte de dialogue Modify Template . Dans cette boîte de dialogue vous pouvez éditer le nom du modèle et un fichier servant de modèle.
	Ce bouton efface le modèle apparaissant en surbrillance dans la liste. Notez que ceci n'efface que la référence au fichier .SK2 correspondant, et non le fichier lui-même.

Option	Description
	Ce bouton charge le fichier .SK2 associé au modèle apparaissant en surbrillance dans la page ChemSketch pour l'édition.
	Affiche l'emplacement du document associé au modèle apparaissant en surbrillance dans la liste.

Notez que la seule différence entre le fichier modèle et un fichier ordinaire est que l'on peut trouver le fichier modèle dans la boîte de dialogue **User Template Window Organizer**. C'est en fait le même qu'un document ordinaire avec l'extension .SK2. Il y a plusieurs avantages à sauvegarder des fichiers de cette façon :

- Vos fichiers .SK2 éparpillés sur plusieurs emplacements seront rassemblés dans l'Organiseur de la Fenêtre Modèle.
- Vous pouvez attribuer un nom au modèle plus descriptif que le nom de fichier réel. Ceci reflètera mieux le contenu du document et permettra de retrouver le document facilement. De plus, il est possible de retrouver le document rapidement en pré-visualisant son contenu dans le champ de prévisualisation de la **Fenêtre de Modèle**.

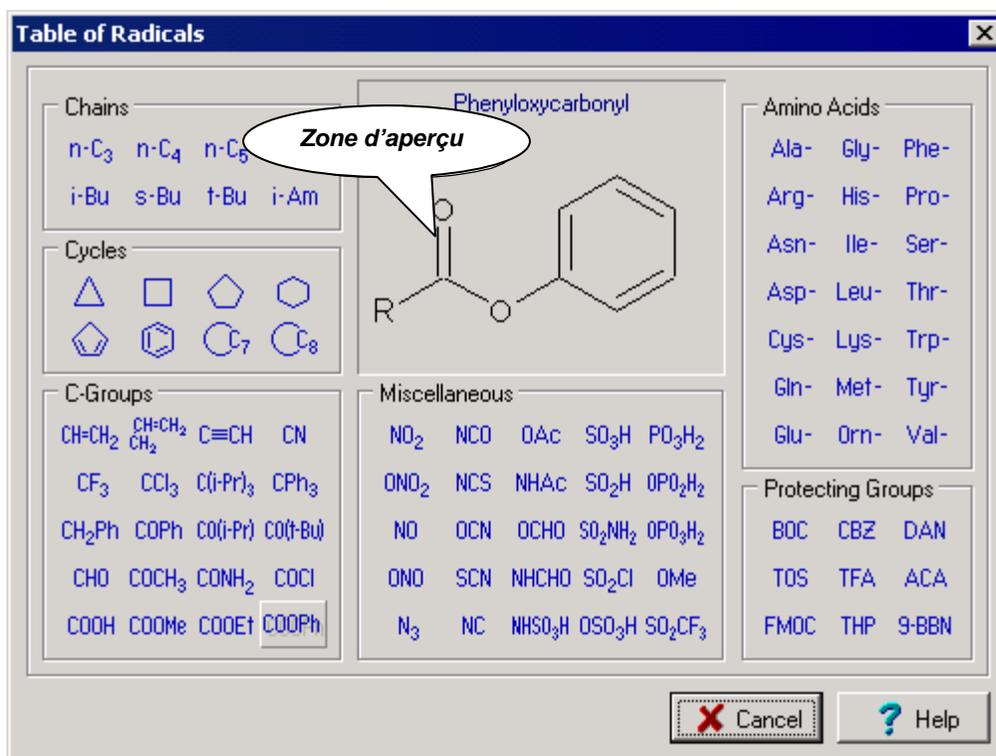
3.13.3 Enregistrer le modèle Utilisateur

Cette commande permet d'enregistrer le document ACD/ChemSketch en cours en tant que modèle utilisateur. Si votre document n'a jamais été enregistré auparavant, la boîte de dialogue **Save Document As** apparaît. Dès que vous enregistrez votre document, la boîte de dialogue **Save User Template** apparaît, et vous devez y spécifier le nom du modèle à associer à votre document.

Dès que le document est enregistré en tant que modèle, son contenu devient disponible dans la **Fenêtre Modèle** sous la forme d'un onglet supplémentaire dans la boîte de dialogue **Organiseur de Modèle** dans la liste des modèles Utilisateur (pour plus d'informations, voir les Sections 3.13.1 et 3.13.2 respectivement).

3.13.4 Tableau de Radicaux

Cette commande affiche le Tableau de Radicaux contenant les radicaux les plus fréquemment utilisés pour un dessin de structure rapide.



Lorsque votre curseur passe au-dessus d'un radical, les informations s'y rapportant s'affichent dans la zone de prévisualisation. Notez que le « R » dans la structure radicalaire représente la position d'attachement à d'autres structures dans la zone de dessin.

Pour choisir un radical en vue d'un dessin, cliquez sur le bouton du radical souhaité. Le Tableau de Radicaux se ferme et une ombre est attachée au curseur. Cliquez dans l'espace vide pour insérer une structure sans liaison du radical choisi, ou cliquez sur n'importe quel atome pour le lier au radical choisi. Pour remplacer un des atomes d'une molécule dessinée par l'atome du radical (c'est-à-dire que le radical sera attaché sans liaison), cliquez sur l'atome correspondant en maintenant la touche SHIFT enfoncée lors de l'insertion de la structure radicalaire.

Vous pouvez retourner l'ombre du radical en appuyant sur TAB sur le clavier. Vous pouvez utiliser l'ombre du radical autant de fois que vous le souhaitez jusqu'à ce que vous cliquiez avec le bouton droit de la souris pour annuler ce mode.

Lorsqu'un radical est choisi dans le Tableau de Radicaux, son bouton correspondant est automatiquement ajouté à la barre d'outils Références (pour plus d'informations, voir la Section 3.8). Pour effacer les radicaux de la barre d'outils Références, double-cliquez sur un espace vide dans la barre d'outils.

Raccourcis :

Clavier :

F6

Barre d'outils Références :



3.13.5 Table Périodique

Cette commande ouvre la boîte de dialogue **Table Périodique des Eléments**. Cette boîte de dialogue permet de choisir un nouvel élément pour le dessin et de visualiser des informations détaillées s'y rapportant (symbole, nom, numéro atomique, densité, masse, valence typique ou états d'oxydation, et configuration électronique).

Notez que selon l'état du bouton **Changer le Mode de Navigation**, le fonctionnement de cette boîte de dialogue sera légèrement différent :

Action	Etat du bouton Changer le Mode de Navigation	
	position tirée ()	position enfoncée ()
Pour afficher un élément en surbrillance et afficher la photo et des informations s'y rapportant	pointez sur l'élément souhaité	cliquez sur l'élément souhaité
Pour pouvoir insérer l'élément sélectionné dans l'espace de travail	cliquez sur l'élément souhaité	cliquez sur OK

Vous pouvez effectuer l'une des actions suivantes avec l'élément choisi :

- Cliquer sur un espace vide pour insérer l'atome au point d'insertion.
- Pointer la souris sur n'importe quel atome dans l'espace de travail et le faire glisser vers un espace vide sur l'écran. Une nouvelle liaison apparaît avec l'atome choisi à son extrémité.
- Avec l'outil **Draw Normal**  (pour plus d'informations, voir la Section 3.6.5), cliquer sur n'importe quel atome dans la zone de dessin pour le remplacer par l'atome choisi.
- Avec l'outil **Draw Continuous**  (pour plus d'informations, voir la Section 3.6.6), double-cliquez sur un atome pour faire apparaître une nouvelle liaison simple avec l'atome choisi.

La Table Périodique des Eléments comprend des images de tous les éléments chimiques stables dans leur forme naturelle. Pour afficher la photo d'un élément, cliquez sur **Afficher Photos d'un élément**  dans la **Table Périodique des Eléments**, puis pointez ou cliquez sur l'élément souhaité (selon la position du bouton **Changer le Mode de Navigation**).

Astuce Pour conserver la photo d'un élément sur toutes les fenêtres, le bouton **Toujours Au-Dessus** doit être dans sa position enfoncée .

La Table Périodique des Eléments comprend des onglets comportant les données suivantes :

- Onglet **Général** : données générales sur un élément
- Onglet **NMR** : Isotope, Numérotation Spin, Abondance, Moment Magnétique, Rapport Magnétogyrique, Moment Quadripôle, Fréquence, et Réceptivité
- Onglet **Masse** : Isotope, Abondance, et Masse Exacte
- Onglet **Coloration** : options vous permettant d'appliquer la coloration selon quatre modèles différents (Classique, Etats Agrégatifs, Métalliques/Non Métalliques, ou Radioactivité) ou de supprimer toute coloration.

Si les onglets ne sont pas visibles, cliquez sur **Show/Hide Extra Data** . Les onglets sont affichés par défaut.

Lorsqu'un atome est pris de la boîte de dialogue **Table Périodique des Eléments**, son bouton est automatiquement ajouté à la barre d'outils Atomes (pour plus d'informations, voir la Section 3.7). Pour effacer les atomes sélectionnés par l'utilisateur de la barre d'outils Atomes, et revenir au paramétrage par

défaut d'origine, double-cliquez sur un espace vide dans la barre d'outils, puis cliquez sur **Yes** dans le message qui apparaît.

Note Pour les non métalliques, l'atome inséré apparaît dans son état de valence le plus bas en tant que dérivatif hydride, alors que pour les métalliques, l'atome inséré apparaît dans son état d'oxydation le plus bas en tant qu'ion.

Raccourcis :

Clavier :

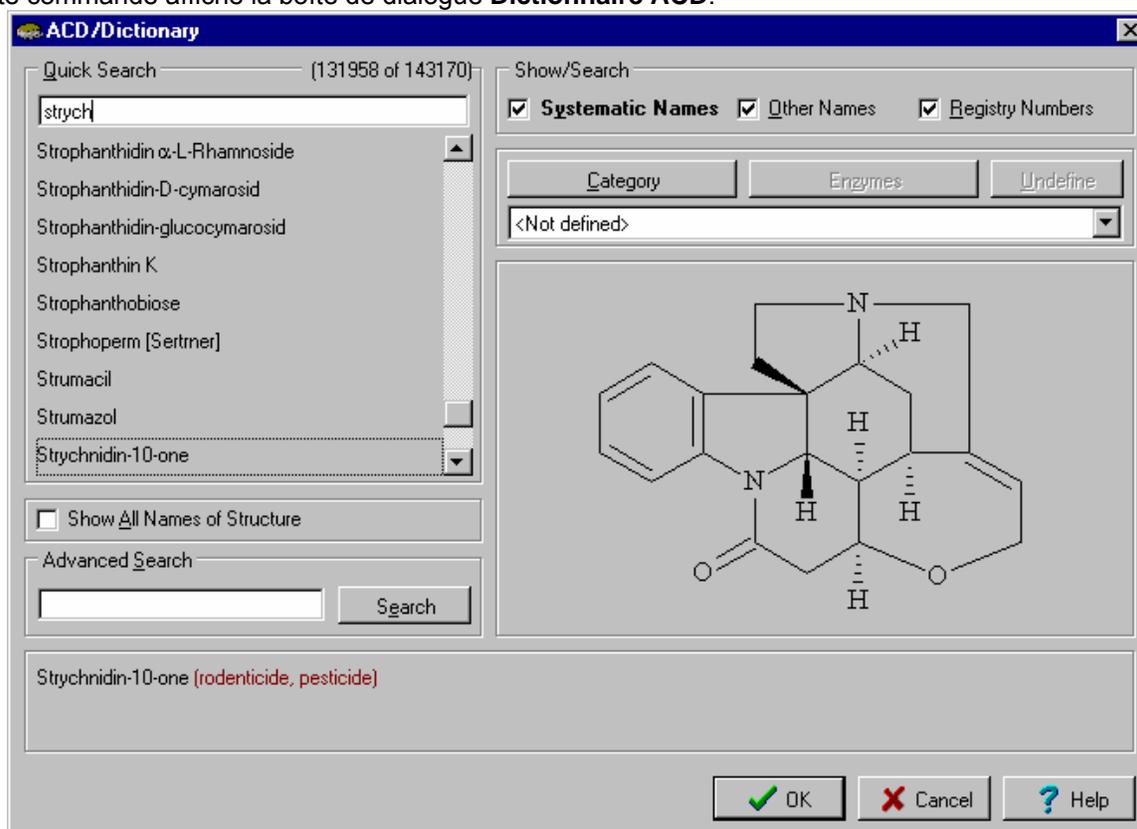
F7

Barre d'outils Atomes :



3.13.6 Dictionnaire – Version Commerciale uniquement !

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Dictionnaire ACD**.



ACD/Dictionnaire est un programme d'ACD/Labs qui vous permet de trouver des structures chimiques d'après leur nom systématique ou non systématique (ainsi que d'après des parties de leur nom), leur catégorie thérapeutique ou les enzymes inhibés, et leur numéro d'enregistrement. Vous pouvez copier ces structures dans d'autres programmes ACD/Labs et dans des applications Windows.

S'il n'y a une ou des structures dessinées ou sélectionnées dans l'espace de travail, et que l'option **Auto Search Structure** est cochée, le choix de cette commande affiche la boîte de dialogue vous demandant si vous souhaitez rechercher la structure dessinée dans le dictionnaire.

Note Le module Dictionnaire ACD est uniquement inclus dans la version commerciale de ChemSketch et n'est pas disponible dans la version gratuite.

3.14 Menu Options

Ces commandes de menu permettent de définir les options de visualisation écran : ajuster la façon dont le curseur, le bord, le quadrillage écran et la palette de couleurs apparaissent sur votre écran. Elles permettent également de changer les angles, la longueur des liaisons, et les caractéristiques de l'optimisation 3D.

3.14.1 Préférences

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Préférences** où il est possible de définir les préférences de fonctionnalité dans ChemSketch.

3.14.1.1 Boîte de Dialogue Préférences : Onglet Général

Dans cet onglet, vous pouvez définir des paramètres communs aux mode Structure et Dessin :



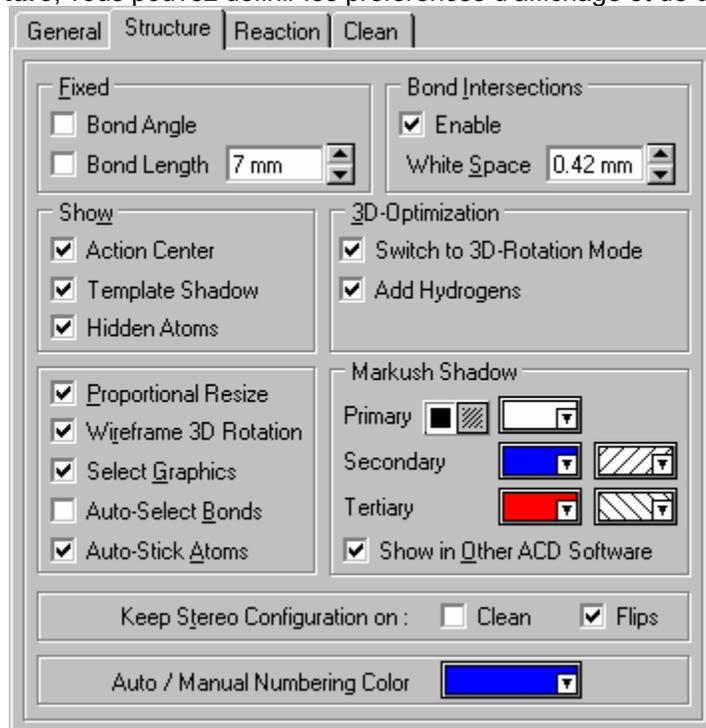
Cet onglet contient les options suivantes :

Option	Description
View	Dans cette zone, vous pouvez spécifier les objets à afficher : La case Ruler contrôle l'affichage de la règle. Les règles sont utiles pour déterminer la taille et la position des objets. La case RSS contrôle l'affichage de la barre d'Informations RSS. Pour plus d'informations sur les options RSS, voir la Section 2.5.1. Sélectionnez/Désélectionnez la case Guides pour afficher ou masquer les guides qui apparaissent sur chaque règle, indiquant la position du curseur. Notez que cette option

Option	Description
	est disponible si la case Ruler est sélectionnée. La case Palette permet d'afficher ou de masquer la Palette de Couleurs (voir la Section 2.4). Dans la liste Measurement Units , spécifiez les unités à utiliser pour les mesures dans toutes les boîtes de dialogue.
Borders	Sélectionnez la case Printable Area pour afficher les lignes en pointillés matérialisant les limites de la zone imprimable. Notez que les marges de la zone imprimable varient selon l'imprimante. Sélectionnez la case Page Margins pour afficher les lignes en pointillés matérialisant les marges de la page. Vous pouvez définir les marges dans la boîte de dialogue Page Setup (Menu Fichier).
Highlight Color	Dans cette case vous pouvez spécifier la couleur à utiliser en surbrillance lorsque vous pointez avec le curseur sur des éléments de structure et des objets de dessin.
Grid	Permet de spécifier la disposition du quadrillage : <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> en forme de rectangles  </div> <div style="text-align: center;"> hexagonal vertical  </div> <div style="text-align: center;"> hexagonal horizontal  </div> </div>
Visible	Cette case permet d'afficher ou de masquer le quadrillage. Cette option est également contrôlée par la commande Show Grid (Menu Options).
Snap on Grid	Si cette case est sélectionnée, les objets s'alignent automatiquement sur le quadrillage (qu'il soit visible ou non) lorsque vous les déplacez ou les créez. Cette option est également accessible par la commande Snap On Grid (menu Options). Notez que si cette option est activée, les angles de liaison et les longueurs de liaison fixes (onglet Structure) sont ignorés.
Horizontal Step / Vertical Step	Dans la case Horizontal Step vous pouvez spécifier la distance horizontale* entre les points de quadrillage du quadrillage rectangulaire ou horizontalement hexagonal. Dans la case Vertical step vous pouvez spécifier la distance verticale entre les points du quadrillage rectangulaire ou hexagonal verticalement.*
Keep Draw Tool Active	Si cette case est sélectionnée, les outils de dessin de la barre d'outils Dessin (sauf l'outil Texte ) restent actifs jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail. Si cette case est désélectionnée, l'outil Select/Move/Resize  devient actif après chacune de vos utilisations d'un outil.
Curseur Informatif	Contrôle l'affichage ou le masquage du curseur. C'est un curseur affichant le pourcentage de redimensionnement, les nouvelles coordonnées de l'objet lors de son déplacement et de sa rotation, le nombre d'atomes dans la chaîne lors du dessin de chaînes atomiques, etc.
Directories	Dans cette zone, vous pouvez spécifier le nom des dossiers dans lesquels des informations relatives à la configuration seront stockées. Dans la case Private , vous pouvez spécifier le dossier d'enregistrement de la configuration du programme ChemSketch (fichiers TEMPLATE.CFG et QRSTYLES.STL). Dans la case Default , vous pouvez spécifier le dossier que vous souhaitez définir comme dossier en cours pour la première fois lorsque vous ouvrez les boîtes de dialogue Save As , Open , Import ou Export dans la session de travail en cours.

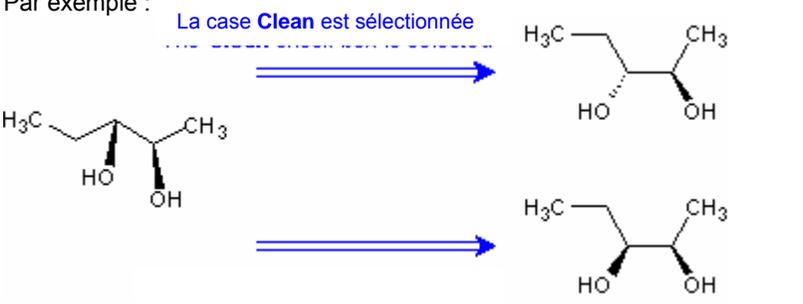
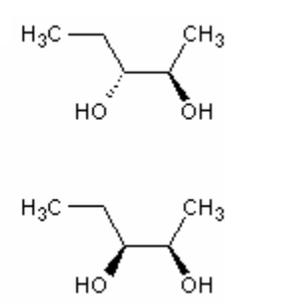
3.14.1.2 Boîte de dialogue Préférences : onglet Structure

Dans l'onglet **Structure**, vous pouvez définir les préférences d'affichage et de dessin des structures.



Cet onglet contient les options suivantes :

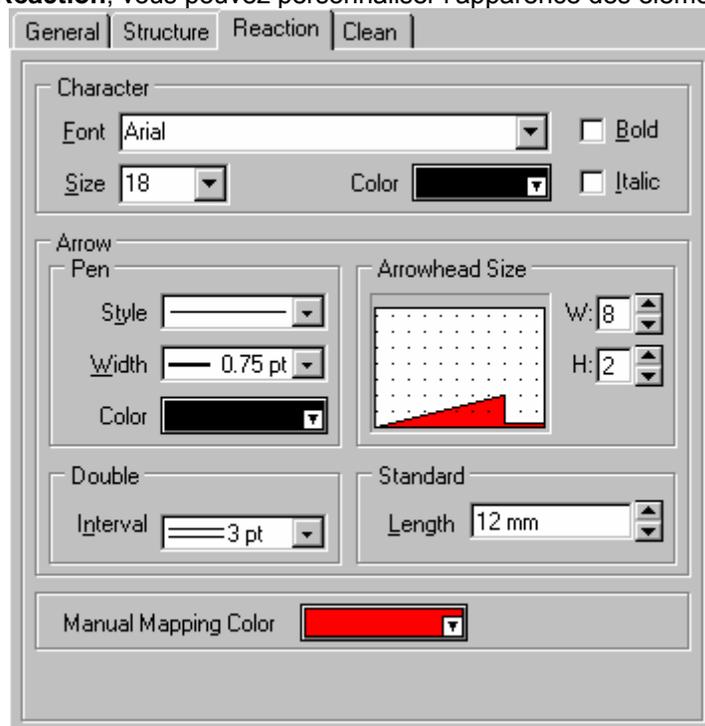
Option	Description
Fixed	Dans la zone Fixed vous pouvez contrôler le dessin de la structure. Si vous sélectionnez la case Bond Angle , vous pourrez dessiner des liaisons à un angle multiple de 15 degrés. Si la case Bond length est sélectionnée, vous pourrez dessiner des liaisons d'une longueur multiple de la valeur spécifiée dans la case adjacente. Si l'une des cases ci-dessus est grisée, cela peut signifier que la case Snap on Grid est sélectionnée dans l'onglet Général de cette boîte de dialogue. Pour rendre les cases de la zone Fixed disponibles, désélectionnez la case Snap on Grid .
Action Center	Sélectionnez cette case pour visualiser le signe spécial indiquant le centre de rotation ou de redimensionnement lorsque vous utiliserez l'outil Select/Rotate/Resize  . Ceci vous aidera à visualiser le point par rapport auquel les objets sont redimensionnés ou par rapport auquel ils pivotent.
Template Shadow	Si cette case est sélectionnée, l'ombre de la structure modèle sera affichée près du curseur lorsque vous utiliserez l'outil Instant Template , ou utiliserez des modèles de la Table des Radicaux ou de la Fenêtre Modèle .
Hidden Atoms	Si cette case est sélectionnée, les atomes cachés seront affichés lorsque vous déplacerez le curseur sur eux dans la structure.
Proportional Resize	Si cette case est sélectionnée, les étiquettes d'atomes sont redimensionnées proportionnellement à leurs liaisons lorsque la structure est redimensionnée. Si cette case est désélectionnée, les étiquettes d'atomes restent inchangées lorsque la structure est redimensionnée.
Wireframe 3D rotation	Si cette case est sélectionnée, toutes les liaisons, simples ou non, seront visualisées comme simples liaisons pendant la rotation 3D. Si vous voulez visualiser la structure telle qu'elle a été dessinée (avec tous les types de liaisons inchangés), désélectionnez cette case pendant la rotation 3D.
Select Graphics	Si cette case est sélectionnée, dans le mode Structure il est possible de sélectionner, déplacer et redimensionner les objets créés dans le mode Dessin (texte, formes, flèches, etc.), ainsi que les flèches et signes « plus »

Option	Description
	des réactions. Si cette case est désélectionnée, vous ne pouvez manipuler les structures que dans le mode Structure.
Autoselect Bonds	<p>Si cette case est sélectionnée, lorsque vous maintenez la touche SHIFT enfoncée et cliquez sur deux atomes ou liaisons avec les outils Select/Move  ou Select/Rotate/Resize  actifs, la liaison entre les deux est aussi sélectionnée.</p> <p>Si cette case est décochée, vous pouvez sélectionner les atomes ou liaisons en maintenant la touche SHIFT enfoncée et en cliquant sur chacun d'eux séparément (afin de pouvoir laisser une liaison désélectionnée si ses voisines sont sélectionnées). De plus, si vous maintenez la touche SHIFT enfoncée et cliquez sur une liaison sélectionnée, ses voisines restent sélectionnées.</p>
Auto-stick Atoms	Sélectionnez cette case si vous voulez que les atomes ou liaisons soient automatiquement collés soit dans le mode Move soit dans le mode Templates (voir les Sections 3.6.1 et 3.6.26), ou lorsque vous collez une structure depuis le presse-papier. Notez qu'un atome colle au curseur dans n'importe quel mode. Le mode est inversé en appuyant sur la touche CTRL et <i>vice versa</i> .
Bond Intersections	Dans la zone Bond Intersection vous pouvez contrôler le point d'intersection des liaisons. Si vous sélectionnez la case Enable , ACD/ChemSketch crée automatiquement une sorte d'espace dans la liaison d'arrière-plan (celle qui a été dessinée en premier parmi les deux liaisons croisées). Vous pouvez spécifier la taille d'un espace dans la liaison d'arrière-plan en utilisant la case White Space .
3D-Optimization	<p>Dans cette zone, sélectionnez la case Switch to 3D-Rotation Mode si vous voulez que l'outil 3D rotation  (voir la Section 3.6.3) soit automatiquement activé une fois l'optimisation 3D terminée.</p> <p>Sélectionnez la case Add Hydrogens si vous voulez que des hydrogènes soient ajoutés à la structure une fois l'optimisation 3D terminée.</p> <p>Pour plus de détails sur l'outil Optimisation 3D, voir la Section 3.12.4.</p>
Markush Shadow	<p>Dans cette zone, vous pouvez ajuster les options des liaisons de Markush. Ces options sont particulièrement utiles si certains des atomes d'une structure font partie de 2 ou 3 associations de Markush. Vous pouvez sélectionner la couleur et l'ombrage des atomes faisant partie d'une association de Markush primaire (créée en premier), secondaire (créée en second) et tertiaire (créée en troisième).</p> <p>Pour rendre l'ombre de Markush disponible dans d'autres logiciels ACD/Labs, par exemple dans toutes les bases de données, sélectionnez la case Show in Other ACD Software.</p>
Keep Stereo Configuration on	<p>Dans cette zone, sélectionnez la case Clean pour que la configuration des centres stéréo reste inchangée lorsque la commande Clean Structure est appliquée.</p> <p>Par exemple :</p>
<p style="text-align: center;">La case Clean est sélectionnée</p> 	
	<p>Sélectionnez la case Flips pour que la configuration des centres stéréo reste inchangée lorsque vous utilisez les outils Flip on Bond, Flip Top to bottom ou Flip Left to Right. Par exemple, lorsque vous appliquez l'outil Flip Left to Right, vous obtenez le résultat suivant:</p>

Option	Description
Auto/Manual Numbering Color	Dans cette case vous pouvez spécifier la couleur des numéros atomiques insérés manuellement ou automatiquement. Pour plus de détails sur la numérotation atomique, voir les Sections 3.12.14 et 3.7.8.

3.14.1.3 Boîte de dialogue Préférences : onglet Réaction

Dans l'onglet **Réaction**, vous pouvez personnaliser l'apparence des éléments de réaction.



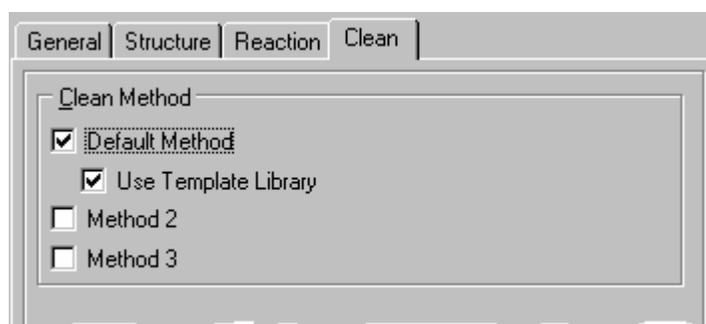
Cet onglet contient les options suivantes :

Option	Description
Character	Dans cette zone vous pouvez spécifier le style de texte des signes « plus » des réactions (pour plus d'informations, voir la Section 3.6.14).
Pen	Dans cette zone vous pouvez définir l'apparence des traits dans les flèches de réaction (voir la Section 3.6.15). Choisissez le style souhaité, la largeur, et la couleur dans les listes déroulantes correspondantes.
Arrowhead Size	Dans cette zone vous pouvez définir l'apparence des têtes de flèche dans les flèches de réaction (voir la Section 3.6.15). Vous pouvez spécifier la largeur et la hauteur de tête de flèche en effectuant un clic/glissé dans le champ de prévisualisation ou en entrant les valeurs dans les champs W (largeur) et H

Option	Description
	(hauteur).
Double	Dans cette zone vous pouvez spécifier l'espace entre les traits d'une flèche de réaction double. Choisissez le trait souhaité dans la liste Interval .
Standard	Dans cette zone vous pouvez définir la longueur de flèche de réaction par défaut. Entrez la valeur souhaitée dans la case Length .
Manual Mapping Color	Cette case permet de sélectionner la couleur appropriée pour le mappage manuel des numéros atomiques (insérés en utilisant l'outil Atom-Atom Map (voir la Section 3.6.18), mode Manuel).

3.14.1.4 Boîte de dialogue Préférences : onglet Uniformiser – **Nouveauté 10.0 !**

Dans l'onglet **Clean**, vous pouvez spécifier la méthode à utiliser lors de l'application de la commande **Uniformiser la Structure**.



Vous pouvez choisir la méthode de représentation de structure souhaitée en sélectionnant les cases correspondantes. Si vous sélectionnez plusieurs cases, elles seront toutes appliquées l'une après l'autre chaque fois que vous cliquerez sur **Uniformiser la Structure**  dans la barre d'outils Structure, ou choisissez la commande **Uniformiser la Structure** dans le menu **Outils**. Pour plus d'informations sur cette commande, voir la Section **Error! Reference source not found.**

Si la case **Use Template Library** est sélectionnée, la représentation atomique standard dans des structures polycycliques est appliquée.

Voici un exemple de méthodes d'uniformisation avec la structure de l'*adamantane*  :

Méthode d'Uniformisation	Représentation de la Structure
Méthode par Défaut sans l'aide de la Bibliothèque de Modèles	
Méthode par Défaut à l'aide de la Bibliothèque de Modèles	
Méthode 2	

Méthode d'Uniformisation	Représentation de la Structure
Méthode 3	

3.14.2 Afficher le Quadrillage

Cette commande permet d'afficher ou de masquer les lignes de quadrillage dans l'espace de travail.

Note Pour changer la densité et le type de quadrillage, utilisez les options de la boîte de dialogue **Préférences** (pour plus d'informations, voir la Section 3.14.1.1).

Raccourci clavier : CTRL + W

3.14.3 Alignement Quadrillage

Cette commande vous permet d'activer la possibilité d'aligner des objets sur le quadrillage lorsqu'ils sont déplacés ou créés. Notez que le quadrillage peut être activé même si les lignes de quadrillages sont cachées.

Note Pour changer la densité et le type de quadrillage, utilisez les options de la boîte de dialogue **Préférences**.

Raccourci clavier : CTRL + Q

3.14.4 Afficher la Palette

Cette commande permet d'afficher ou non la Palette de Couleurs située au-dessous de l'espace de travail. Pour plus d'informations sur les options de la Palette de Couleurs, voir la section 2.4.

3.14.5 Afficher RSS

Cette commande permet d'afficher ou non la barre d'Informations RSS. Pour plus d'informations sur les options RSS, voir la section 2.5.1.

Vous pouvez également afficher ou non la barre d'Informations RSS en sélectionnant ou désélectionnant la case **RSS** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**).

Note Il n'est possible de masquer la barre d'Informations RSS dans la **version commerciale uniquement !**

3.14.6 Définir le Style de Dessin de Structure

Cette commande permet de définir l'un des styles disponibles comme le style par défaut pour le dessin de structures, c'est-à-dire que toutes les structures dessinées seront d'un style défini. La liste de styles contient les styles prédéfinis pour la publication, et les styles définis par l'utilisateur.

Note Vous pouvez définir vos propres styles en utilisant le panneau **Propriétés** (pour plus d'informations, voir la Section 3.12.1).

Pour appliquer le style choisi aux objets sélectionnés, dans le menu **Options**, choisissez **Apply Structure Drawing Style**.

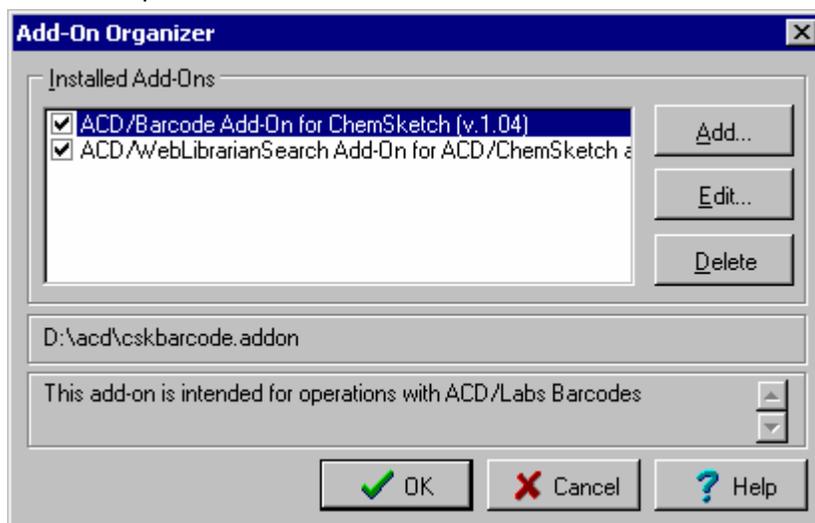
3.14.7 Appliquer le style de dessin de structure

Cette commande applique le style de structure par défaut à la ou aux structure(s) et/ou à l'élément ou aux éléments sélectionnés.

Note Pour définir le style souhaité comme style par défaut, dans le menu **Options**, choisissez **Set Structure Drawing Style** (pour plus d'informations, voir Section précédente).

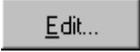
3.14.8 Organiseur de Compléments

Cette commande vous permet d'afficher la boîte de dialogue **Organiseur de Compléments** dans laquelle vous pouvez spécifier les applications supplémentaires (add-ons) à utiliser pour développer les possibilités du programme. Les compléments peuvent être créés par des tiers puis ajoutés au logiciel ACD/Labs pour accroître ses possibilités.



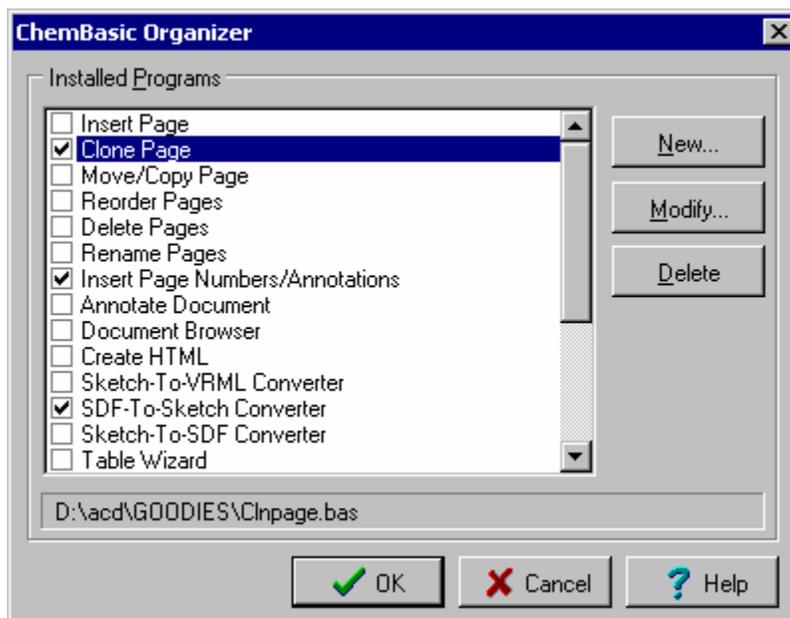
La boîte de dialogue contient les options suivantes:

Option	Description
<i>Liste de compléments</i>	Cette case fournit la liste des applications supplémentaires pouvant être utilisées pour développer les possibilités du programme. Pour éditer la liste, utilisez les boutons sur la droite. Sélectionnez les cases des compléments à ajouter au menu Add-Ons et/ou à la barre d'outils supérieure (si ceci est spécifié dans les propriétés du complément). Pour sélectionner/désélectionner tous les compléments, faites un clic droit dans la case, puis dans le menu raccourci qui apparaît, choisissez la commande correspondante. Notez que par défaut, toutes les commandes

Option	Description
	sont sélectionnées. L'application d'un complément peut être spécifiée lors de sa création.
	Affiche la boîte de dialogue Ouvrir dans laquelle vous pouvez spécifier le nom et l'emplacement d'un fichier complémentaire (.ADDON) à ajouter à la liste.
	Affiche la boîte de dialogue dans laquelle vous pouvez éditer les propriétés du complément sélectionné dans la liste.
	Supprime le complément sélectionné de la liste.
<i>Emplacement du Complément</i>	Cette case affiche l'emplacement du complément actuellement sélectionné dans la liste.
<i>Description du Complément</i>	Dans cette case, vous pouvez visualiser la du complément sélectionné dans la liste au-dessus.

3.14.9 Organiseur ChemBasic

Cette commande permet de gérer les programmes écrits sous ACD/ChemBasic (un langage de programmation spécial qui permet à l'utilisateur de personnaliser les logiciels ACD/Labs). Le choix de cette commande affiche la boîte de dialogue **Organiseur ChemBasic** où vous pouvez ajouter des programmes ChemBasic à démarrer à partir de la fenêtre ChemSketch, créer un bouton de raccourci pour chaque programme, et attacher un message d'aide à chaque bouton.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

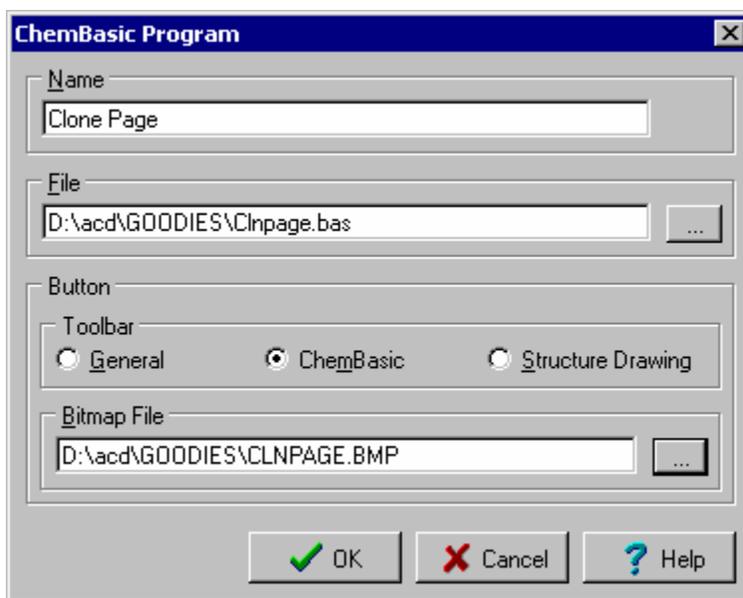
Option	Description
<i>Programmes Installés</i>	Affiche une liste des programmes ChemBasic installés. Pour installer/désinstaller des programmes, utilisez le bouton sur la droite de cette liste. Pour ajouter à la barre d'outils ChemSketch des boutons de raccourci des programmes correspondants, sélectionnez leur case.
	Ce bouton permet d'installer un programme ChemBasic et ajoute son nom à la liste. Cliquer sur ce bouton affiche la boîte de dialogue ChemBasic Program où vous pouvez spécifier le programme, son bouton de raccourci, ainsi que du texte

Option	Description
	d'aide. Pour plus d'informations, voir la Section 3.14.9.1. Ce bouton permet de modifier le nom, le raccourci, ou l'emplacement du programme actuellement affiché en surbrillance dans la liste. Cliquer sur ce bouton affiche la boîte de dialogue ChemBasic Program . Pour plus d'informations, voir la Section 3.14.9.1.
	Efface le programme actuellement affiché en surbrillance de la liste et désinstalle le fichier .BAS correspondant.

3.14.9.1 Boîte de Dialogue Programme ChemBasic

Dans cette boîte de dialogue, vous pouvez définir certaines options de lancement du programme ChemBasic sélectionné.

Cette boîte de dialogue apparaît lorsque, dans la boîte de dialogue **Organiseur ChemBasic**, vous cliquez sur le bouton **Modify** ou le bouton **New**.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Name	Dans la zone Name , spécifiez le texte qui apparaîtra comme rappel en jaune lorsque le curseur sera pointé sur le bouton spécifié du programme ChemBasic.
File	Dans la zone File , spécifiez le nom et l'emplacement du programme ChemBasic à installer.
Toolbar	Dans la zone Toolbar , spécifiez la barre d'outils dans laquelle le bouton de raccourci doit être placé : <ul style="list-style-type: none"> • Barre d'outils Générale (voir la Section 3.5) ; • Barre d'outils ChemBasic Supplémentaire (qui apparaîtra entre les barres d'outils Générale et Structure ; ou • Barre d'outils Structure (voir la Section 3.6).
Bitmap File	Dans la zone Bitmap File , spécifiez le nom et l'emplacement du fichier bitmap (.BMP) à utiliser comme bouton de raccourci, et qui démarrera le programme ChemBasic spécifié plus haut. Si vous n'avez pas l'image du bouton du programme, vous pouvez utiliser la commande Run ChemBasic (voir la Section 3.9.9) pour le lancement des programmes n'ayant pas de boutons de raccourci.

3.15 Menu Documents

Les commandes de ce menu vous permettent de passer d'un document ouvert à un autre, ou de fermer simultanément tous les documents ouverts.

Ce menu contient également une liste de tous les documents actuellement ouverts. Cliquez sur le nom d'un document pour rendre ce document actif. Notez que vous ne pouvez avoir qu'un seul document visible à la fois. Il n'est pas possible d'empiler de multiples fenêtres document ou de les afficher en cascade.

Note Vous pouvez ouvrir jusqu'à dix documents à la fois.

3.15.1 Suivant

Cette commande affiche le document suivant dans la liste Ouvrir Document en tant que document actif. Notez que vous ne pouvez avoir qu'un seul document visible à la fois. Vous ne pouvez juxtaposer ou afficher en cascade plusieurs fenêtres de document.

Note Si un seul document est ouvert, la fonction **Suivant** est inactive.

Raccourci clavier : CTRL + TAB

3.15.2 Précédent

Cette commande affiche le document précédent dans la liste Ouvrir Document en tant que document actif. Notez que vous ne pouvez avoir qu'un seul document visible à la fois. Vous ne pouvez juxtaposer ou afficher en cascade plusieurs fenêtres de document.

Note Si un seul document est ouvert, la fonction **Previous** est inactive.

Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + TAB

3.15.3 Fermer Tout

Cette commande ferme tous les documents ouverts. Après avoir fermé les documents, ChemSketch affiche automatiquement un document « noname ».

Note En fermant un document non sauvegardé, ChemSketch vous invite à sauvegarder votre travail si vous ne l'avez pas encore fait.

3.16 Menu Compléments

Ce menu contient les commandes des applications des compléments installés qui peuvent être utilisés pour développer les possibilités du programme (les compléments peuvent être créés par des tiers).

Vous pouvez installer les applications supplémentaires à l'aide de la boîte de dialogue **Organiseur de Compléments** (pour plus d'informations sur cette boîte de dialogue, voir la Section 3.14.8).

3.17 ACD/Labs en Ligne (I-Lab)

ACD/Labs en Ligne (I-Labs ou laboratoire Interactif) est un service Internet qui permet les opérations suivantes :

- Utiliser la fonction dessin chimique ACD/ChemSketch et importer des capacités pour pouvoir entrer des données structurales dans I-Lab
- Visualiser des spectres CNMR et HNMR prédits ou stockés (en utilisant les Visualisateurs HNMR ou CNMR inclus dans le complément)
- Parcourir des bases de données : CNMR, HNMR, FNMR, PNMR, et NNMR
- Attacher les noms chimiques générés à vos structures (sont disponibles : Nom IUPAC, Nom Index CAS, et Nom de Structure)
- Passer en revue et sauvegarder des propriétés physico-chimiques (Point d'ébullition, LogP, LogD, pKa, H(vap), Pression de Vapeur, Solubilité aqueuse, BCF, et Coefficient d'Adsorption)
- Parcourir des bases de données physico-chimiques provenant de l'interface ChemSketch.

Selon les paramètres URL du serveur définis dans les Options ACD/I-Lab, vous pouvez vous connecter à *I-Lab Public* ou *I-Lab : Edition Intranet*.

I-Lab Public : ACD/I-Lab comprend des services gratuits et d'autres payants. L'inscription et l'adhésion à I-Lab sont gratuites. Vous n'avez rien à payer si vous utilisez uniquement les services gratuits.

I-Lab : Edition Intranet : vous payez le logiciel dans son ensemble plutôt que chaque opération de calcul. Le logiciel **I-Lab Edition Intranet** peut inclure n'importe quel assortiment des services disponibles.

Afin d'accéder aux ressources ACD/I-Lab, il vous faut :

- Une connexion Internet directe :
I-Lab Public: Accès par l'adresse <http://www2.acdlabs.com>
I-Lab : Edition Intranet: Accès au serveur sur lequel I-Lab: Edition Intranet est installé.
- Une adresse email (seulement pour I-Lab Public)
- ChemSketch et le complément I-Lab pour ChemSketch :
I-Lab Public: Version 4.0 ou suivantes (il y a à la fois des versions commerciales et gratuites. La version gratuite peut être téléchargée sur <http://www.acdlabs.com/download>)
I-Lab : Edition Intranet: Version 6.0 ou suivantes.

Dès que vous installez ACD/ChemSketch et le complément I-Lab et démarrez le programme, vous pouvez voir l'interface ChemSketch standard avec le menu I-Lab supplémentaire et la barre d'Etat dont la partie gauche est modifiée (le nombre de commandes de menu et d'éléments sur la barre d'Etat est différent selon le serveur).

Pour plus d'informations sur la fonctionnalité du complément I-Lab, voir la documentation ACD/I-Lab séparée.

3.18 Menu ACD/Labs

Ce menu affiche la liste des programmes ACD/Labs d'un logiciel actuellement installé sur votre ordinateur. Dès que vous avez installé le premier logiciel ACD/Labs et avez lancé l'un de ses programmes, le nom du programme apparaît dans le menu. Pour placer le nom du programme ACD/Labs dans la liste, il doit simplement être lancé une fois.

Pour charger l'un des programmes de la liste, cliquez simplement sur son nom. Notez que la fenêtre ACD/ChemSketch est commune à tous les programmes ACD/Labs.

Note La liste peut contenir des programmes ne provenant que d'un seul logiciel. Si vous possédez plusieurs logiciels ACD/Labs installés sur votre ordinateur vous ne pourrez alors lancer des programmes d'un logiciel à l'intérieur d'un autre.

3.18.1 Programme chargé suivant

Si vous avez plusieurs programmes ACD/Labs installés et actuellement ouverts, cette commande vous permet de passer à un autre programme chargé. Vous pouvez également utiliser les touches SHIFT et ESC pour passer d'un programme chargé à un autre. Maintenez la touche SHIFT enfoncée et appuyez sur ESC. Puis dans le panneau affichant les programmes ACD/Labs actuellement chargés, choisissez le programme souhaité en appuyant sur ESC plusieurs fois. Lorsque le programme désiré est sélectionné, lâchez la touche SHIFT pour passer au programme choisi.

3.18.2 Fermer Tout

Cette commande ferme tous les programmes du logiciel ACD/Labs actuellement lancés. Pour fermer seulement un programme, dans le menu **Fichier**, choisissez **Exit**, ou cliquez sur **Fermer**  dans la barre de titre.

3.19 Menu Aide

Les commandes de ce menu vous permettent d'obtenir de l'aide sur le sujet souhaité et d'obtenir plus d'informations sur l'entreprise, le produit logiciel, etc.

3.19.1 Rubriques d'Aide

Cette commande permet d'afficher le contenu du système d'aide en ligne ACD/ChemSketch.

3.19.2 Utiliser l'Aide

Cette commande permet d'afficher les consignes d'utilisation de l'aide en ligne.

3.19.3 Astuce du jour

Cette commande affiche le contenu des sujets d'aide « Astuce du jour », qui décrivent des techniques et procédures plus efficacement.

3.19.4 Instructions pour auteurs

Cette commande affiche le contenu des sujets d'aide « Instructions pour les Auteurs ».

3.19.5 Aide ChemBasic

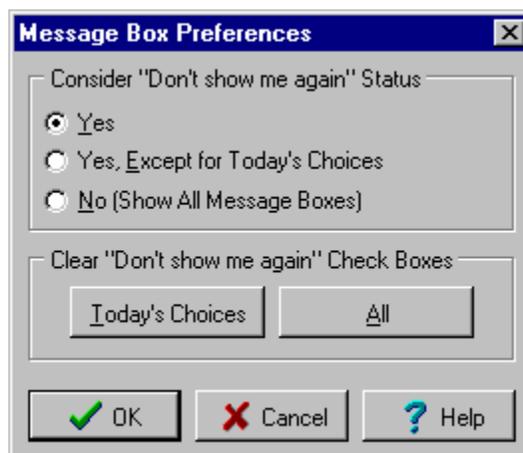
Cette commande affiche le contenu de l'aide en ligne ACD/ChemBasic.

ACD/ChemBasic est un langage de programmation particulier qui permet de personnaliser les logiciels ACD/Labs. Il est téléchargeable gratuitement depuis notre site Web <http://www.acdlabs.com>. Pour plus d'informations sur les caractéristiques d'ACD/ChemBasic, voir le *Guide de l'utilisateur ACD/ChemBasic* séparé.

3.19.6 Préférences de Boîte Message

Cette commande affiche la boîte de dialogue **Message Box Preferences** où vous pouvez préciser vos préférences à propos des cases « **Don't show/ask me again** » des messages du programme.

L'exécution de certaines opérations dans le logiciel ACD/Labs peut faire apparaître des boîtes message vous invitant à faire quelque chose ou vous informant d'une condition particulière. Il est utile au départ de prendre en considération toutes les informations que le programme vous propose. Toutefois, lorsqu'un certain nombre de cas du même type a été traité, il est possible que vous préféreriez le mode « silencieux ». C'est pourquoi de telles boîtes message peuvent contenir des cases **Don't show me again** ou **Don't ask me again** par lesquelles l'on détermine si le message doit être affiché ou non chaque fois qu'une action spécifique est exécutée.



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Option	Description
Prise en compte du statut « Don't show me again »	
Yes	Sélectionnez cette option pour que tous les paramètres du statut Don't show me again soient respectés dans toutes les boîtes message. En d'autres termes, les messages dont cette case est sélectionnée seront éliminés et ceux dont la case est désélectionnée seront affichés.
Yes, Except for Today's Choice	Sélectionnez cette option pour que le statut Don't show me again soit respecté à moins qu'un paramètre ait été changé à la date calendaire d'aujourd'hui. C'est-à-dire que les messages dont cette case est sélectionnée seront éliminés et ceux dont la case est désélectionnée seront affichés. Cependant les messages dans lesquels le statut de ces cases a été changé aujourd'hui seront affichés sans tenir compte du fait que la case Don't show me again soit ou non sélectionnée. Notez que l'activation de cette option ne change pas le statut de ces cases mais les ignore seulement.
No (Show All Message Boxes)	Sélectionnez cette option pour ignorer les paramètres du statut Don't show me again , et afficher chaque boîte message. Notez que l'activation de cette option ne change pas le statut de ces cases mais les ignore seulement.
Désélection des cases « Don't show me again »	

Option	Description
Today's Choices	Désélectionne les cases Don't show me again seulement dans les boîtes message dont le statut de ces cases a été modifié à la date calendaire d'aujourd'hui.
All	Désélectionne les cases Don't show me again de toutes les boîtes message, vous permettant ainsi d'afficher toutes les boîtes message.

Important Les modifications dans cette boîte de dialogue affecteront TOUS les produits ACD/Labs de tous les logiciels ACD/Labs installés (à la fois réseau et locaux) de l'utilisateur en cours.

EXEMPLE 1

Lorsque vous essayez d'exporter un document contenant un objet OLE provenant de la fenêtre ChemSketch vers un fichier PDF Adobe, les message suivant apparaît : « *Le document en cours contient des objets OLE qui ne peuvent être exportés vers un document PDF. Ils seront donc ignorés* ».

Si vous ne souhaitez pas que ce rappel s'affiche lorsque vous exportez, dans le message, sélectionnez la case **Don't show me again**. Lorsque vous exporterez à nouveau le document contenant des objets OLE non exportables, ce message ne s'affichera plus.

Si vous décidez ensuite d'être tenu au courant des objets OLE qui ne peuvent être exportés, vous pouvez désélectionner l'option **Don't show me again** en utilisant la boîte de dialogue **Préférences de Boîte Message**.

EXEMPLE 2

Lorsque vous importez un fichier mol MDL contenant une molécule dont la taille n'est pas prise en charge par le système, la boîte message **Avertissement Importation** apparaît avec les choix **Yes** et **No**, vous demandant si la structure importée doit ou non être redimensionnée.

Si vous souhaitez que la molécule soit redimensionnée à cet instant et chaque fois suivante, dans ce message, sélectionnez la case **Don't ask me again** et cliquez sur **Yes**. Dans ce cas, la prochaine fois qu'une molécule d'une taille non prise en charge sera importée, elle sera redimensionnée en mode silencieux, sans que le message n'apparaisse, comme si vous aviez cliqué sur **Yes** dans la boîte message.

Si vous souhaitez conserver la taille actuelle de la molécule, et toutes les fois suivantes, dans ce message, sélectionnez la case **Don't ask me again** et cliquez sur **No**. Dans ce cas, la prochaine fois qu'une molécule d'une taille non prise en charge sera importée, aucun message n'apparaîtra et la molécule ne sera pas redimensionnée, comme si vous aviez cliqué sur **No** dans la boîte message.

De même, si vous décidez plus tard de pouvoir choisir manuellement si les molécules doivent ou non être redimensionnées, vous pouvez utiliser l'option ou le bouton souhaité dans la boîte de dialogue **Préférences de Boîte Message** pour que le message **Avertissement Importation** apparaisse à nouveau après chaque importation.

3.19.7 Documents

Cette commande vous permet d'afficher la documentation (Manuel de Référence, Tutorat, Guide de l'utilisateur) liée au programme en cours.

3.19.8 Aller sur le site Web ACD/Labs

Cette commande permet de lancer le navigateur Internet par défaut et de se rendre sur la page Web ACD/Labs <http://www.acdlabs.com/>.

3.19.9 Rapport d'erreur / Demande d'article

Selon l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue **Bug Report Settings** (voir la section suivante), cette commande permet d'envoyer un rapport d'erreur et une demande d'article par le site Web ACD/Labs ou par e-mail.

3.19.10 Configuration du rapport d'erreur

Cette commande affiche la boîte de dialogue dans laquelle vous pouvez choisir la façon dont vous souhaitez envoyer des rapports d'erreur et des demandes d'articles. Notez que dans les deux cas il vous est demandé de remplir un formulaire dans lequel vous pouvez préciser les problèmes rencontrés pendant le travail avec le logiciel ACD/Labs, ou déposer une demande d'une nouvelle fonction à inclure dans l'un des produits ACD/Labs.

Les deux options suivantes sont disponibles :

Option	Description
Go to the ACD/Labs Bug Report Page	Si vous sélectionnez cette option, chaque fois que vous choisissez la commande Bug Report / Feature Request , votre navigateur Internet par défaut est lancé et la page Web ACD/Labs (http://www.acdlabs.com/feedback/bugs.html) s'ouvre.
Send E-mail to ACD/Labs Bug Processing Center	Si vous sélectionnez cette option, chaque fois que vous choisissez la commande Bug Report / Feature Request , votre gestionnaire de messagerie par défaut est activé. Le programme crée un message d'après le modèle prédéfini.

3.19.11 A Propos d'ACD/ChemSketch

Cette commande affiche les informations concernant votre copie du logiciel ACD/Labs, qui comprennent le numéro de version, les droits de reproduction, et les informations concernant votre inscription utilisateur. Elle contient également des informations sur les possibilités de contacter ACD/Labs.

De plus, en cliquant sur le bouton **License ID** vous pouvez visualiser votre ou vos numéros de Licence. Le ou les numéros de Licence sont nécessaires dans le cas où vous sollicitez notre assistance technique.

4. Mode Dessin

4.1 Objectifs

Ce chapitre décrit en détails les options, les outils et les fonctions disponibles dans le mode Dessin. Il contient les éléments suivants :

- Les capacités générales du mode Dessin
- Une vue d'ensemble de l'interface du mode Dessin
- La description détaillée de chaque commande, outil et partie d'interface disponibles dans le mode Dessin.

Pour passer au mode Dessin, cliquez sur **Dessin**  dans la barre d'outils Générale.

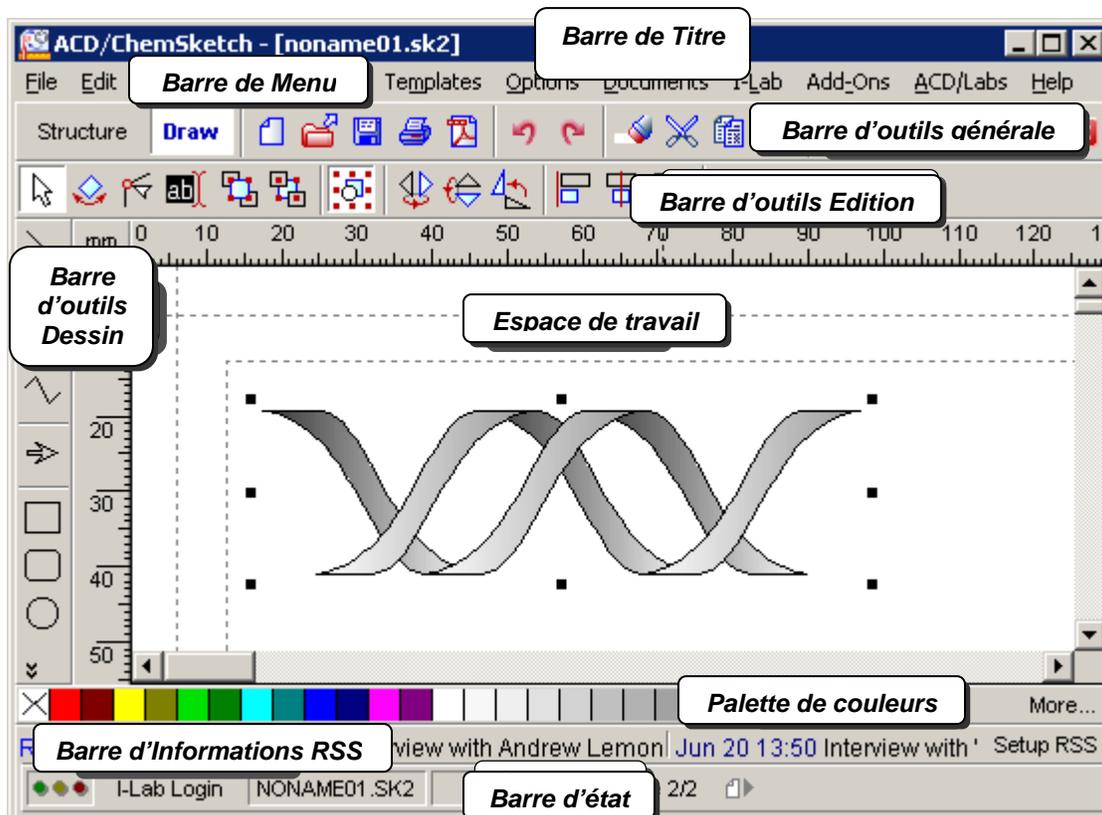
4.2 Informations générales

Dans le mode Dessin, vous pouvez exécuter les opérations suivantes:

- Dessiner des objets graphiques tels que des traits, des flèches, des rectangles, des ellipses, des arcs, des traits de forme variable et des polygones, et insérez des légendes, des crochets, et des étiquettes de texte.
- Manipuler les objets : dissocier des objets complexes ou les assembler en objets plus complexes, aligner, retourner, pivoter, redimensionner, et adapter les objets aux dimensions de la page.
- Ouvrir, fermer, et imprimer des documents; couper, copier, et coller les objets souhaités; effacer et zoomer sur les objets. Vous pouvez également coller votre travail dans d'autres applications Windows et insérer dans votre travail des objets provenant d'autres applications Windows.
- Créer des documents multi pages, renommer et effacer des pages, insérer de nouvelles pages et organiser toutes les pages d'un document.
- Contrôler l'emplacement des objets sur la page avec la règle ou le quadrillage. Vous pouvez choisir différentes unités de mesures pour la règle et insérer ou supprimer le quadrillage en utilisant les commandes du menu **Options**.

4.3 Ecran

Ci-dessous est présenté l'écran avec le mode Dessin activé. Les noms et positions des barres d'outils et des autres éléments utilisés dans le manuel entier sont présentés.

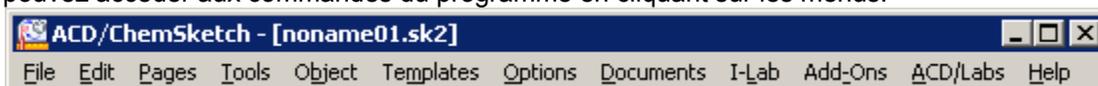


Le tableau suivant fournit une courte description de chaque élément d'interface désigné dans l'image ci-dessus :

Elément d'interface	Fonction
Barre de titre	Cette barre comporte le nom du programme, le nom et l'emplacement du fichier actuellement ouvert, ainsi que des boutons de contrôle de la taille et de la position de la fenêtre (pour plus d'informations sur la barre de Titre, voir la Section 2.3).
Barre de menu	Cette barre contient une série de mots. A chaque mot est attachée une liste ('menu') des commandes correspondantes, pour travailler dans la fenêtre ChemSketch dans le mode Dessin (pour une description détaillée de chaque menu et des commandes qu'il contient, voir les Sections 4.8-4.18).
Barre d'outils générale	Cette barre d'outils inclut des outils présents à la fois dans le mode Structure et le mode Dessin, et qui vous aideront dans les tâches en rapport avec les deux modes telles que : sauvegarder, ouvrir des fichiers, annuler/rétablir des opérations, copier et coller, effectuer des zooms avant et arrière, et insérer divers modèles (pour plus d'informations, voir la Section 3.5).
Barre d'outils ChemBasic	Cette barre d'outils comprend des outils supplémentaires qui étendent la fonctionnalité d'ACD/ChemSketch. Notez que la barre d'outils ChemBasic est présente dans les modes Structure et Dessin si vous avez précédemment installé les outils Bonus (pour plus d'informations, voir l'Annexe C).
Barre d'outils Edition	Cette barre d'outils est présente uniquement dans le mode Dessin. Elle comprend des outils pour modifier les attributs graphiques des objets dans l'espace de travail. Notez que vous ne pouvez pas éditer des structures chimiques avec les outils de la barre d'outils Edition (sauf les redimensionner et les faire pivoter). Pour plus d'informations, voir la Section 4.6.
Barre d'outils Dessin	Cette barre d'outils contient des boutons pour la création d'objets graphiques tels que traits, rectangles, cases texte, etc. (pour plus d'informations, voir la Section 4.7).
Espace de travail	L'espace de travail est la page ChemSketch actuellement ouverte dans laquelle vous pouvez dessiner et éditer les objets souhaités (structures, réactions, images).
Palette de couleurs	Elle permet de modifier rapidement la couleur du stylo et la couleur de remplissage des objets sélectionnés (pour plus d'informations, voir la Section 2.4).
Barre d'état	Cette barre contient des informations qui peuvent être utiles sur le moment : le nom du fichier .SK2 ouvert, le numéro de page, la formule moléculaire de la structure sélectionnée, etc. Elle contient également un bouton d'accès automatique à I-Lab. Pour plus d'informations, voir la Section 2.6.

4.4 Barre Menu

Juste au-dessous de la barre de Titre se trouve la barre Menu, qui comporte les menus du programme. Vous pouvez accéder aux commandes du programme en cliquant sur les menus.



Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans les menus de la fenêtre ChemSketch dans le mode Dessin, voir les Sections 4.8-4.18.

4.5 Barre d'outils Générale

Dans les modes Structures et Dessin, sous la barre Menu, se trouve la barre d'outils Générale.

Pour plus d'informations sur les boutons disponibles dans cette barre d'outils, voir la Section 3.5.

4.6 Barre d'outils Edition

Dans le mode Dessin, cette barre d'outils est affichée sous la barre d'outils Générale. La barre d'outils Edition contient des boutons permettant de changer les attributs graphiques des objets de l'espace de travail. Notez que vous ne pouvez pas éditer de structures chimiques avec les outils de la barre d'outils Edition (seulement les redimensionner et les faire pivoter). Utilisez le mode Structure pour éditer la structure.

La barre d'outils Edition contient les boutons suivants :

Bouton	Fonction
	Cet outil vous permet de sélectionner, de déplacer et de redimensionner des objets (pour plus d'informations, voir la section 4.6.1).
	Cet outil vous permet de sélectionner, de déplacer et de faire pivoter des objets (pour plus d'informations se référer à la section 4.6.2).
	Utilisez cet outil pour changer la forme d'un objet en éditant (déplaçant, ajoutant, supprimant) les noeuds de l'objet. Lorsque vous cliquez sur ce bouton, la partie droite de la barre d'outils Edition est remplacée par la barre d'outils Noeud. Pour plus d'informations se référer à la section 4.6.3.
	Cet outil vous permet d'éditer du texte. Lorsque vous cliquez sur ce bouton, la partie droite de la barre d'outils Edition est remplacée par la barre d'outils Texte. Pour plus d'informations se référer à la section 4.6.4.
	Amène les objets d'arrière-plan sélectionnés au premier plan (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.2).
	Déplace les objets du premier plan vers l'arrière-plan (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.3).
	Regroupe/sépare les objets sélectionnés et vous permet de placer des données dans des tableaux (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.1).
	Fait pivoter le(s) objet(s) sélectionné(s) autour de l'axe vertical (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.4).
	Fait pivoter le(s) objet(s) sélectionné(s) autour de l'axe horizontal (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.5).
	Fait pivoter le(s) objet(s) sélectionné(s) de 90° (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.6).
	Aligne horizontalement les objets sélectionnés à gauche (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.7).
	Aligne horizontalement les objets sélectionnés par rapport au centre (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.7).
	Aligne horizontalement les objets sélectionnés par rapport au bord droit (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.7).
	Aligne verticalement les objets sélectionnés par rapport au bas (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.8).
	Aligne verticalement les objets sélectionnés par rapport au centre (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.8).
	Aligne verticalement les objets sélectionnés par rapport au haut (pour plus d'informations se référer à la section 4.12.8).

Remarque Le contenu de la barre d'outils peut être personnalisé suivant vos préférences. Faites un clic droit sur la barre d'outils pour afficher le menu raccourci (pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1).

4.6.1 Bouton Sélectionner/Déplacer/Redimensionner

Ce bouton  active l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**, vous permettant de sélectionner, déplacer, et redimensionner les objets graphiques créés dans les modes Structure et Dessin. Si vous double-cliquez sur l'objet sélectionné alors que cet outil est actif, vous pouvez changer son style en utilisant le panneau **Objets** qui apparaît (pour plus d'informations, voir la Section 4.11.7).

Le tableau ci-dessous résume les actions à effectuer pour sélectionner des objets :

Pour sélectionner	Action
Un objet	Cliquer sur l'objet ou faire un glissé autour de l'objet.
Plusieurs objets	Maintenir la touche SHIFT enfoncée pendant la sélection, effectuée comme décrit ci-dessus.
Tous les objets dans l'espace de travail	Appuyer sur CTRL + A. Notez que le fait d'appuyer sur CTRL + A à nouveau désélectionne tous les objets.

Le tableau ci-dessous résume les actions à effectuer pour déplacer des objets :

Pour déplacer	Action
Un ou plusieurs objets sélectionnés	Pointer sur l'objet de manière à ce que le contour apparaisse autour de celui-ci, et faire un glissé.
Un ou plusieurs objets sélectionnés en en laissant une copie	Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé.
Un objet sélectionné en contraignant le déplacement de l'objet	Maintenir la touche SHIFT enfoncée pendant le déplacement ; le déplacement de l'objet sélectionné est contraint par les axes X ou Y.

Remarque Si la case **Informative Cursor** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, les nouvelles coordonnées de l'objet (relatives à sa position d'origine) sont affichées près du curseur.

Le tableau ci-dessous récapitule les actions nécessaires pour redimensionner les objets :

Pour redimensionner	Actions
L'objet sélectionné relativement à son coté ou son coin opposé.	Pointez sur les poignées de sélection pour que le curseur se transforme en flèches à double sens (↑, ⇔, ↖, ↗), et faites un glissé. Faire glisser les poignées de sélection latérales Haut/bas redimensionne la hauteur de l'objet, faire glisser les poignées latérales droite/gauche sa largeur ; et faire glisser les poignées de coin redimensionne l'objet proportionnellement dans toutes les directions.
L'objet sélectionné relativement à son centre.	Maintenez la touche CTRL en tirant sur les poignées de sélection comme décrit ci-dessus.
L'objet sélectionné proportionnellement, de 5% de sa taille	Maintenez la touche SHIFT enfoncée en tirant sur les poignées de sélection latérales comme décrit ci-dessus.
L'objet sélectionné pour que la hauteur et la largeur changent indépendamment.	Maintenez la touche SHIFT enfoncée en tirant sur les poignées de sélection de coin comme décrit ci-dessus.
Remarque	Si la case Informative Cursor de la boîte de dialogue Préférences (onglet Général) est sélectionnée, le pourcentage de redimensionnement sera affiché près du curseur.

Vous pouvez rapidement alterner entre cet outil et l'outil **Sélectionner/Déplacer/Pivoter**  par un clic droit dans la zone de travail ou en cliquant sur l'une des poignées de sélection.

4.6.2 Bouton Sélectionner/Déplacer/Faire pivoter

Ce bouton  active l'outil **Sélectionner/Déplacer/Pivoter** qui permet de sélectionner, de déplacer et de faire pivoter les objets créés dans les modes Structure et Dessin. Si vous effectuez un double-clic sur l'objet sélectionné en ayant activé cet outil, vous pouvez changer son style en utilisant le panneau **Objets** qui apparaît (pour plus d'informations, voir la Section 4.11.7).

Le tableau ci-dessous récapitule les actions nécessaires pour sélectionner des objets :

Pour sélectionner	Action
Un objet	Cliquer sur l'objet ou faire un glissé autour de l'objet.

Pour sélectionner	Action
Plusieurs objets	Maintenir la touche SHIFT enfoncée pendant la sélection, effectuée comme décrit ci-dessus.
Tous les objets dans l'espace de travail	Appuyer sur CTRL+A. Notez que le fait d'appuyer sur CTRL + A à nouveau désélectionne tous les objets.

Le tableau ci-dessous récapitule les actions nécessaires pour déplacer des objets :

Pour déplacer	Action
Un ou plusieurs objets sélectionnés	Pointer sur l'objet de manière à ce que le contour apparaisse autour de celui-ci et faire un glissé.
Un ou plusieurs objets sélectionnés en en laissant une copie	Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé.
Un objet sélectionné en contraignant le déplacement de l'objet	Maintenir la touche SHIFT enfoncée pendant le déplacement ; le déplacement de l'objet sélectionné est contraint aux axes X ou Y.
Remarque	Si la case Informative Cursor de la boîte de dialogue Préférences (onglet Général) est sélectionnée, les nouvelles coordonnées de l'objet (relatives à sa position d'origine) sont affichées près du curseur.

Le tableau ci-dessous récapitule les actions nécessaires pour faire pivoter les objets :

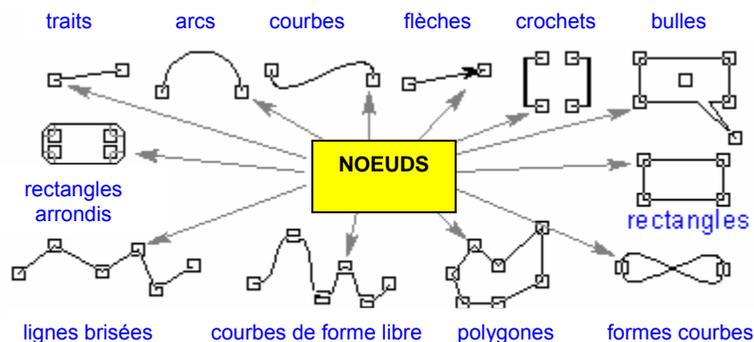
Pour faire pivoter	Action
L'objet sélectionné autour de son centre.	Pointer sur les poignées de sélection pour que le curseur se transforme en  et faire glisser.
L'objet sélectionné de 15 degrés d'incréments.	Maintenir la touche SHIFT enfoncée pendant la rotation, comme décrit ci-dessus.
Remarque	Si la case Informative Cursor de la boîte de dialogue Préférences (onglet Général) est sélectionnée, l'angle de rotation sera affiché près du curseur.

Vous pouvez rapidement passer de cet outil à l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  et vice-versa en cliquant sur l'une des poignées de sélection ou par un clic droit dans l'espace de travail.

4.6.3 Bouton Edition de noeuds

Ce bouton  active l'outil **Edition de Nœuds**, qui vous permet de modifier la forme des objets suivants : traits, arcs, courbes, flèches, traits de forme variable, rectangles, rectangles arrondis, polygones, crochets et bulles.

Lorsque vous cliquez sur le bouton **Edition de Nœuds**, la barre d'outils Noeud remplace la partie droite de la barre d'outils Edition. Pour éditer un objet, sélectionnez-le pour faire apparaître les nœuds :



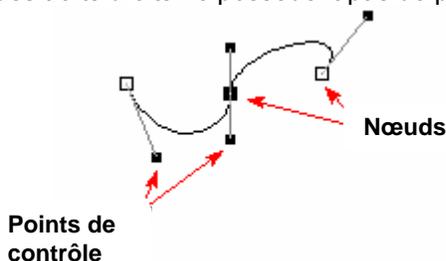
Note Vous ne pouvez sélectionner qu'un seul objet à la fois lorsque l'outil **Edition de Nœuds** est activé.

La fonction de l'outil **Edit Nodes**  varie selon le type d'objet sélectionné :

Type d'objet	Fonction
Trait/Flèche/Courbe/Polygone /Forme courbe	Changer la forme par déplacement des noeuds et des points de contrôle et en utilisant la barre d'outils Nœud.
Rectangle	Arrondir les coins par déplacement des nœuds.
Rectangle arrondi	Changer le rayon des coins par déplacement des nœuds.
Arc	Changer la longueur par déplacement des noeuds.
Crochets/Bulles	Modifier la taille et la forme par déplacement des nœuds.

Note **Nœuds**: les points à l'extrémité de segments de traits et de courbes dans un objet courbe.

Points de contrôle: les points s'étendant à partir des nœuds le long d'un objet courbe qui déterminent l'angle auquel la courbe passe dans le nœud. Les points de contrôle apparaissent lorsque vous sélectionnez un nœud. Les nœuds associés à des traits droits ne possèdent pas de points de contrôle.

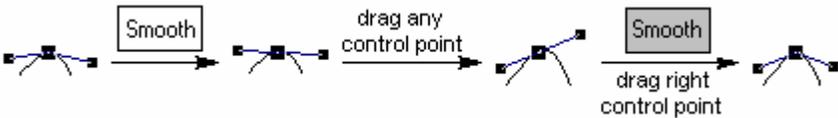
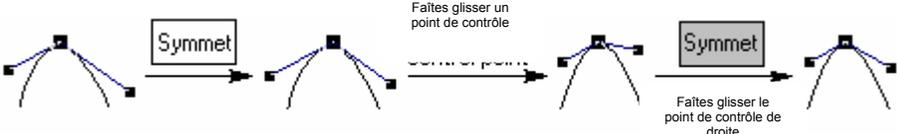


4.6.3.1 Barre d'outils Nœuds

La barre d'outils Nœuds apparaît lorsque vous cliquez sur **Edition de Nœuds**  dans la barre d'outils Edition, et elle remplace la partie droite de la barre d'outils Edition.

Elle contient des boutons permettant de manipuler les nœuds et les points de contrôle (pour plus d'informations, voir la section précédente).

Bouton	Fonction
 Relier Sommets	Relie les noeuds d'extrémité d'une courbe à forme libre ou d'un trait brisé sélectionné par un trait droit.
 Déconnecter Sommets	Efface le segment entre deux noeuds adjacents sélectionnés.
 Ajouter un Nœud	Ajoute un nœud entre deux noeuds adjacents sélectionnés. Chaque clic supplémentaire sur ce bouton ajoute de nouveaux nœuds entre les nœuds existants.
 Supprimer un Nœud	Supprime les nœuds sélectionnés.
 Changer en trait	Convertit la courbe ou le segment de courbe sélectionnés en trait. Si le segment est défini en tant que trait, il n'a pas de points de contrôle et sa forme ne peut donc pas être modifiée.
 Changer en courbe	Convertit le segment de trait sélectionné en courbe. Une fois que le segment est défini en tant que courbe, vous pouvez modifier sa forme en manipulant ses noeuds et points de contrôle. Pour visualiser les points de contrôle, cliquez sur le nœud.
 Lissé	Cliquez sur ce bouton si vous souhaitez qu'un noeud et ses deux points de contrôle adjacents soient alignés et se déplacent ensemble autour du nœud lorsque vous effectuez un glissé. Désactivez le bouton Smooth pour interrompre cette fonction.

Bouton	Fonction
	
 Symmet	<p>Cliquez sur ce bouton pour égaliser les distances entre les nœuds sélectionnés et leurs points de contrôle adjacents. Ces distances seront modifiées de manière égale lorsque vous tirerez un point de contrôle. Désactivez le bouton Symmet pour interrompre cette fonction.</p> 
 Aligner Gauche	Aligne les nœuds sélectionnés horizontalement à gauche, les uns par rapport aux autres.
 Centrer Horizontalement	Aligne les nœuds sélectionnés horizontalement au centre, les uns par rapport aux autres.
 Aligner Droite	Aligne les nœuds sélectionnés horizontalement à droite, les uns par rapport aux autres.
 Aligner Bas	Aligne les nœuds sélectionnés verticalement en bas, les uns par rapport aux autres.
 Centrer verticalement	Aligne les nœuds sélectionnés verticalement au centre, les uns par rapport aux autres.
 Aligner Haut	Aligne les nœuds sélectionnés verticalement en haut, les uns par rapport aux autres.

Remarque

Pour sélectionner les nœuds souhaités, cliquez dessus en maintenant la touche SHIFT enfoncée.
Si vous n'avez pas besoin de tous les boutons disponibles sur la barre d'outils, vous pouvez la personnaliser. Pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.

4.6.4 Bouton Edition de Texte

Ce bouton  active l'outil **Edition de Texte** permettant d'éditer le texte créé à l'aide des outils **Texte**  et **Texte Artistique**  (pour plus d'informations, voir la Section 4.7.11).

Pour éditer le texte, sélectionnez la case texte souhaitée et cliquez sur ce bouton. Modifiez le texte comme vous le souhaitez en utilisant les boutons de la barre d'outils Texte. Pour quitter le mode Edition, cliquez en dehors de la case texte.

4.6.4.1 Barre d'outils Texte

La barre d'outils Texte apparaît chaque fois que vous entrez ou modifiez du texte en utilisant l'outil

Edition de Texte , **Texte** , ou **Texte Artistique** . La barre d'outils Texte remplace la partie droite de la barre d'outils Edition. Elle contient les boutons suivants pour le formatage du texte :

Bouton / Case	Fonction
	Dans cette case, vous pouvez spécifier le style de police du texte sélectionné ou du texte à saisir.

Bouton / Case	Fonction
	Dans cette case, vous pouvez spécifier la taille de police du texte sélectionné ou du texte à saisir.
	Applique le formatage gras (par exemple, texte) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Applique le formatage italiques (par exemple, <i>texte</i>) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Applique le formatage souligné (par exemple, <u>texte</u>) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Applique le formatage barré (par exemple, texte) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Applique le formatage exposant (par exemple, ^{texte}) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Applique le formatage indice (par exemple, _{texte}) au texte sélectionné ou au texte à saisir.
	Transforme les caractères du texte sélectionné ou du texte à saisir en symboles grecs. Nouveauté 10.0 !
	Aligne le texteur la gauche.
	Centre le texte dans la case texte.
	Aligne le texte sur la droite.
	Etire le texte pour qu'il remplisse l'intégralité des lignes entre les bords gauche et droit de la case texte.
	Applique le style de police par défaut spécifié dans le panneau Police (voir Section 4.11.4) au texte sélectionné, et/ou applique le style de paragraphe par défaut spécifié dans le panneau Paragraphe (voir la Section 4.11.5) au paragraphe dans lequel se situe actuellement le pointeur de la souris.
	Enregistre les attributs de police et de paragraphe actuels comme défaut.
Remarque	Si vous n'avez pas besoin de tous les boutons disponibles sur la barre d'outils, vous pouvez la personnaliser. Pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.

4.7 Barre d'outils Dessin

Dans le mode Dessin, cette barre d'outils est affichée verticalement sur la gauche de l'espace de travail. Elle contient des boutons pour la création d'objets graphiques tels que des traits, rectangles, cases texte, etc.

Note Pour passer au mode Sélectionner/Déplacer/Redimensionner, appuyez sur la touche ESC ou, dans la barre d'outils Edition, cliquez sur **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner** .

La barre d'outils Dessin contient les boutons suivants :

Bouton	Fonction
	Cet outil permet de dessiner des traits droits. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.1.
	Cet outil permet de dessiner des arcs. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.2.
	Cet outil permet de dessiner des courbes de forme prédéfinie. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.3.

Bouton	Fonction
	Cet outil permet de dessiner des courbes à forme libre et des traits brisés. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.4.
	Utilisez cet outil pour dessiner des flèches de différentes formes. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.5.
	Cet outil permet de dessiner des rectangles. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.6.
	Cet outil permet de dessiner des rectangles à coins arrondis. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.7.
	Utilisez cet outil pour dessiner des ellipses et des cercles. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.8.
	Utilisez cet outil pour dessiner des formes libres. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.9.
	Permet d'insérer des images bitmaps. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.10.
	Permet d'insérer du texte dans l'espace de travail. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.11.
	Permet de dessiner un tableau de la taille spécifiée. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.12.
	Permet de dessiner des crochets de différents types. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.13.
	Permet de dessiner des bulles. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.14.
	Permet de créer des modèles de rapports ACD/SpecManager. Pour plus d'informations, voir la Section 4.7.15.

Remarque La barre d'outils peut être personnalisée selon vos préférences. Pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.

4.7.1 Bouton Trait

Ce bouton  active l'outil **Trait** permettant de dessiner des traits droits. Cliquez sur ce bouton et faites un glissé dans l'espace de travail pour dessiner un trait.

Lorsque vous maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le glissé, le trait est dessiné à un angle multiple de 15 degrés.

Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé permet de dessiner un trait centré par rapport à la position de départ du curseur.

Les objets dessinés avec l'outil **Trait**  se voient automatiquement attribuer les attributs **Stylo** par défaut en cours tels que définis dans le panneau **Style de Stylo** (voir la Section 4.11.1).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'un trait dessiné sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur le trait et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est

désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un trait.

4.7.2 Boutons Arc

Ces boutons activent une série d'outils permettant de dessiner des arcs. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton pour l'agrandir et afficher les boutons suivants :



Arc de 90°



Arc de 120°



Arc de 180°



Arc de 240°



Arc de 270°

Pour dessiner un arc de la taille souhaitée, cliquez sur le bouton **Arc** correspondant pour le rendre actif, puis faites un glissé dans l'espace de travail. La direction de votre glissé de souris détermine la position de l'arc.

Astuce

Pour changer l'angle de l'arc, utiliser l'outil **Edition de Nœuds**  (voir la Section 4.6.3).

Les attributs par défaut définis dans le panneau **Style de Stylo** (voir la Section 4.11.1) sont automatiquement attribués aux objets dessinés avec l'outil **Arc**.

Remarque

Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'un arc dessiné sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur l'arc et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un arc.

4.7.3 Bouton Courbe

Ce bouton  active l'outil **Courbe** permettant de dessiner des courbes de forme définie. Cliquez sur ce bouton et faites un glissé dans l'espace de travail pour dessiner une courbe.

Lorsque vous maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le glissé, la courbe est dessinée à un angle multiple de 15 degrés.

Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé permet de dessiner une courbe centrée par rapport à la position de départ du curseur.

Les objets dessinés avec l'outil **Courbe** se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans le panneau **Style de Stylo** (voir la Section 4.11.1).

Remarque

Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est

désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné une courbe.

4.7.4 Bouton Traits de forme variable

Ce bouton  active l'outil **Traits de forme variable** permettant de dessiner des courbes de forme libre  et des traits brisés .

Pour dessiner un trait brisé, cliquez plusieurs fois dans l'espace de travail alors que cet outil est actif, et faites un clic droit pour terminer le dessin. Pour dessiner une courbe de forme libre, utilisez la fonction glissé combinée aux clics.

Remarque Vous pouvez ensuite éditer la forme de la courbe dessinée à l'aide de l'outil **Edition de Nœuds** .

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans le panneau **Style de Stylo** (voir la Section 4.11.1).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un trait de forme variable.

4.7.5 Bouton Flèche

Ce bouton  active l'outil **Dessin de Flèche** permettant de dessiner des flèches et d'appliquer des têtes de flèche à un objet linéaire quelconque (traits, arcs, courbes et traits de forme variable). Lorsque vous cliquez sur ce bouton, le panneau **Style de Flèche** apparaît, et vous pouvez y spécifier le style de flèche souhaité. Pour plus d'informations sur les options de ce panneau, voir la Section 4.11.3.

Pour dessiner une flèche, sélectionnez l'un des outils suivants : **Trait** , **Arc** , **Courbe** , ou **Trait de forme variable** , puis cliquez sur l'outil **Flèche**  et faites un glissé dans l'espace de travail. Le dessin terminé, la tête de flèche apparaît à l'extrémité de l'objet.

Pour appliquer une tête de flèche à des objets déjà dessinés, sélectionnez l'objet, choisissez cet outil, puis cliquez sur **Apply** dans le panneau **Style de Flèche** qui apparaît.

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Flèche** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.3).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné une flèche.

4.7.6 Bouton Rectangle

Ce bouton  active l'outil **Rectangle** permettant de dessiner des rectangles et des carrés. Pour dessiner un rectangle de la taille et de la forme désirées, activez cet outil et faites un glissé dans l'espace de travail. Pour dessiner un carré, maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le glissé. Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé permet de dessiner le rectangle ou le carré centré par rapport à la position de départ du curseur.

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un rectangle.

4.7.7 Bouton Rectangle arrondi

Ce bouton  active l'outil **Rectangle Arrondi** permettant de dessiner des rectangles et des carrés arrondis. Pour dessiner un rectangle arrondi de la taille et de la forme désirées, choisissez cet outil et faites un glissé dans l'espace de travail. Pour dessiner un carré arrondi, maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le glissé. Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé permet de dessiner le rectangle ou le carré centré par rapport à la position de départ du curseur.

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est

désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un rectangle arrondi.

4.7.8 Bouton Ellipse

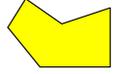
Ce bouton  active l'outil **Ellipse** permettant de dessiner des ellipses et des cercles. Pour dessiner une ellipse de la taille et de la forme désirées, choisissez cet outil et faites un glissé dans l'espace de travail. Pour dessiner un cercle, maintenez la touche SHIFT enfoncée pendant le glissé. Maintenir la touche CTRL enfoncée pendant le glissé permet de dessiner l'ellipse ou le cercle centré par rapport à la position de départ du curseur.

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné une ellipse.

4.7.9 Bouton Polygone

Ce bouton  active l'outil **Polygone** permettant de dessiner des polygones  et des formes courbes .

Pour dessiner un polygone, cliquez successivement dans l'espace de travail alors que cet outil est actif et faites un clic droit pour terminer le dessin. Pour dessiner une forme courbe, utilisez la fonction glissé combinée aux clics.

Remarque Vous pouvez ensuite éditer la configuration de la forme dessinée à l'aide de l'outil **Edition de Nœuds** .

Les objets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné un polygone.

4.7.10 Bouton Insérer Bitmap

Le bouton **Insérer Bitmap**  permet d'insérer des images bitmap externes (formats BMP, JPG, et GIF) dans le corps d'un document ChemSketch. Pour insérer un bitmap, cliquez sur ce bouton, puis cliquez au niveau du point d'insertion, ou sélectionnez la zone d'insertion en effectuant un glissé. Dans la boîte de dialogue **Select Bitmap** qui apparaît, spécifiez le format, le nom et l'emplacement d'un fichier, puis cliquez sur **Open** pour insérer l'image.

Remarque L'image insérée conserve sa taille d'origine si le point d'insertion a été spécifié par un clic. Si toutefois vous avez opté pour le glissé pour effectuer la sélection, les dimensions de l'image changent selon les dimensions de la zone sélectionnée. Vous pouvez éditer les dimensions de l'image insérée en utilisant l'outil

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner .

4.7.11 Bouton Texte

Ce bouton  active l'outil **Texte** permettant d'insérer du texte à un emplacement quelconque dans l'espace de travail.

Si vous cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton **Texte** , les boutons suivants seront visibles:



Texte Formaté



Texte Artistique

ACD/ChemSketch utilise deux types de texte: *Formaté* et *Artistique*. Au contraire du texte *Formaté*, le texte *Artistique* peut être étiré ou compressé pour créer des effets visuels.

Cliquez sur l'outil texte souhaité pour le rendre actif et cliquez dans l'espace de travail pour placer la case texte. Saisissez le texte, et sitôt terminé, cliquez quelque part en dehors de la case texte.

Le texte écrit avec cet outil se voit automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Police** et **Paragraphe** (voir les Sections 4.11.4 et 4.11.5 respectivement).

Remarque Pour modifier le style (police, couleur, etc.) d'un texte existant, double-cliquez sur le texte et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît. Vous pouvez également modifier les attributs de style par défaut en utilisant les outils de la barre d'outils Texte qui apparaît lorsque vous activez l'outil **Texte** (pour plus d'informations sur la barre d'outils, voir la Section 4.7.11).

Pour éditer le texte existant, utilisez l'outil **Edition de Texte**  (pour plus d'informations, voir la Section 4.6.4).

Vous pouvez faire pivoter le texte comme un objet graphique en utilisant l'outil

Sélectionner/Déplacer/Pivoter .

4.7.12 Bouton Tableau

Ce bouton  active l'outil **Tableau** permettant d'insérer un tableau de la taille et du format souhaités. Cliquez sur cet outil puis faites un glissé dans l'espace de travail pour tracer les contours d'une case qui contiendra votre tableau. En relâchant le bouton de la souris, la boîte de dialogue **Insérer Tableau** apparaît, et vous pouvez y définir le nombre de colonnes et de lignes. En cliquant sur **OK** dans cette boîte

de dialogue, le tableau est inséré et la barre d'outils Tableau apparaît, vous permettant de personnaliser votre tableau.

4.7.12.1 Barre d'outils Tableau

La barre d'outils Tableau apparaît au milieu de la barre d'outils Edition si un tableau ou une ou plusieurs des cellules du tableau sont sélectionnés dans l'espace de travail, et si l'un ou l'autre des outils

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner  ou **Sélectionner/Déplacer/Pivoter**  est actif. Cette barre d'outils permet d'éditer les lignes et colonnes d'un tableau, et de manipuler les cases dans lesquelles un tableau peut être disposé.

Bouton	Fonction
Les six boutons suivants servent à l'édition de la ou des colonnes et de la ou des lignes. Notez que ces boutons ne sont disponibles que si une ou plusieurs des cellules du tableau inséré sont sélectionnées.	
	Ajoute une colonne à droite de la colonne dont la cellule est sélectionnée. Les dimensions d'une nouvelle colonne sont les mêmes que celles de la colonne dont la ou les cellules sont sélectionnées. Notez que pour visualiser la ou les colonnes ajoutées, vous devez agrandir les dimensions de la case tableau.
	Ajoute une ligne au-dessous de la ligne dont la cellule est sélectionnée. Les dimensions d'une nouvelle ligne sont les mêmes que celles de la ligne dont la ou les cellules sont sélectionnées. Notez que pour visualiser la ou les lignes ajoutées, vous devez agrandir les dimensions de la case tableau.
	Supprime la colonne contenant une cellule sélectionnée.
	Supprime la ligne contenant une cellule sélectionnée.
	Affiche la boîte de dialogue Largeur de Colonne où vous pouvez saisir la largeur souhaitée de la ou des colonnes sélectionnées. Les colonnes contenant des cellules sélectionnées sont considérées comme sélectionnées (pour sélectionner plusieurs cellules, appuyez sur SHIFT en cliquant dessus).
	Affiche la boîte de dialogue Hauteur de Ligne où vous pouvez saisir la hauteur souhaitée de la ou des lignes sélectionnées. Les lignes contenant des cellules sélectionnées sont considérées comme sélectionnées (pour sélectionner plusieurs cellules, appuyez sur SHIFT en cliquant dessus).
Ces boutons ne sont disponibles que si le tableau entier ou une case de tableau sont sélectionnés. (Pour sélectionner une case, pointez sur son coin supérieur gauche pour que le bord grisé apparaisse autour de la case, puis cliquez. Pour sélectionner plusieurs cases, appuyez sur SHIFT, puis sélectionnez chacune des cases comme décrit ci-dessus).	
	Ajoute une nouvelle case dans le tableau sélectionné.
	Copie une case vide du tableau sélectionné, dans lequel les lignes restantes seront réorganisées si elles ne tiennent pas dans une case.
	Echange le contenu des cases sélectionnées. Notez que vous pouvez échanger le contenu des cases d'un même tableau seulement.
	Supprime le tableau sélectionné ainsi que son contenu et que toutes les cases s'y rapportant.

Remarque Vous pouvez personnaliser le contenu de la barre d'outils en utilisant le menu raccourci. Pour plus d'informations, voir la Section 2.2.1.

4.7.13 Boutons Crochets

Ces boutons activent les outils permettant de dessiner un ou des crochets, des parenthèses, et des accolades. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton  pour faire apparaître un panneau présentant divers types de crochets :

-  **Crochets**
-  **Crochet**
-  **Parenthèses**
-  **Parenthèse**
-  **Accolades**
-  **Accolade**

Pour dessiner les crochets, cliquez sur le bouton, puis faites un glissé dans l'espace de travail, ou pointez sur l'objet et cliquez lorsque les crochets apparaissent autour de lui. Pour dessiner un seul crochet du côté droit ou gauche, faites un glissé de bord à bord horizontalement pour le renverser de gauche à droite.

Les crochets dessinés avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné des crochets.

4.7.14 Bouton Bulles

Ces boutons activent les outils permettant de dessiner des bulles. Cliquez sur le triangle en bas à droite du bouton  pour faire apparaître les boutons supplémentaires suivants, représentant divers types de bulles :

-  **Arrondie**
-  **Carrée**
-  **Ouverte**

Pour dessiner une bulle, choisissez le bouton souhaité et faites un glissé dans l'espace de travail, ou pointez sur un objet dessiné et cliquez lorsque la bulle apparaît autour de lui.

Les bulles dessinées avec cet outil se voient automatiquement attribuer les attributs par défaut définis dans les panneaux **Style de Stylo** et **Style de Remplissage** (voir les Sections 4.11.1 et 4.11.2 respectivement).

Remarque Pour modifier l'épaisseur, le style et la couleur d'une courbe dessinée sans affecter les paramètres par défaut, double-cliquez sur la courbe et définissez les paramètres souhaités dans le panneau **Objets** qui apparaît.

Si la case **Keep Draw Tool Active** de la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**) est sélectionnée, cet outil reste actif jusqu'à ce que vous cliquiez ou fassiez un clic droit dans l'espace de travail (l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient actif). Si cette case est désélectionnée, l'outil **Sélectionner/Déplacer/Redimensionner**  devient immédiatement actif une fois que vous avez dessiné une bulle.

4.7.15 Bouton Modèle de Rapport

ACD/Chemsketch permet de créer des modèles de rapport pour des données compatibles avec les modules 1D NMR, 2D NMR, MASS, UVIR, CURVE, et CHROM d'ACD/SpecManager. Assurez-vous d'être dans le mode Dessin, cliquez sur **Modèle de Rapport**  dans la barre d'outils Dessin, puis faites un glissé dans l'espace de travail pour afficher la boîte de dialogue **ACD/ChemSketch Template**.

Pour plus d'informations sur la création et l'usage des modèles de rapport, reportez-vous au *Manuel de Référence Modèles de Rapport ACD* situé dans le dossier de documentation ACD/Labs (\\DOCS\REPTEMPL.PDF).

4.8 Menu Fichier

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, voir la Section 3.9.

4.9 Menu Edition

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, voir la Section 3.10.

4.10 Menu Pages

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, voir la section 3.11.

4.11 Menu Outils

Les commandes de ce menu vous permettent de modifier l'apparence des objets graphiques. Ces commandes définissent les styles de traits, de remplissage, de flèches, de texte, de paragraphes et d'objets.

Panneaux de style par défaut

ACD/ChemSketch applique le style par défaut à tous les nouveaux objets, à moins que vous ne changiez les paramètres par défaut. Vous pouvez changer le défaut dans le Mode Dessin en définissant un autre style existant comme style par défaut, ou en changeant les attributs du style par défaut dans l'un des panneaux **Stylo**, **Remplissage**, **Flèche**, **Police** et **Paragraphe** dans le menu **Outils**.

Chaque panneau comporte une série de boutons dont les fonctions sont communes :



Le tableau suivant fournit la liste de ces boutons communs :

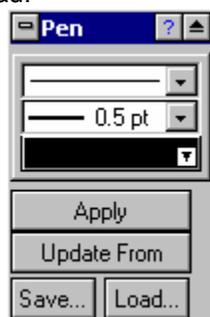
Elément	Fonction
Apply	Applique les paramètres actuels du panneau aux objets sélectionnés.
Update From	Copie les attributs de style du ou des objets dessinés vers le panneau. En cliquant sur ce bouton, le curseur devient une flèche étiquetée From (FROM). Cliquez sur l'objet souhaité pour mettre à jour ses attributs de style dans le panneau.
Save...	Affiche la boîte de dialogue Enregistrer le Style Utilisateur dans laquelle vous pouvez spécifier le nom d'un nouveau style et sélectionner les attributs de style à enregistrer. Pour plus d'informations, voir la Section 4.11.8.1.
Load...	Affiche une liste de styles dans laquelle vous pouvez sélectionner le style dont vous souhaitez ajouter les attributs au panneau. Notez que tous les attributs (police, flèche, remplissage, et stylo) seront également affectés par le style choisi.

4.11.1 Panneau Style du stylo

Cette commande affiche le panneau **Stylo** où vous pouvez spécifier le style par défaut de trait, l'épaisseur et la couleur des dessins des traits, arcs, flèches, rectangles, ellipses, crochets, et bulles.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la Section 4.11.7.

Chaque fois que vous dessinez un nouvel objet, ACD/ChemSketch le remplit en utilisant le style par défaut qui peut être spécifié dans ce panneau.



Ce panneau contient les options suivantes :

Elément	Fonction
	Sélectionnez le type de trait choisi dans cette case.
	Sélectionnez l'épaisseur de trait choisie dans cette case.
	Sélectionnez la couleur de trait choisie dans la palette de couleurs.

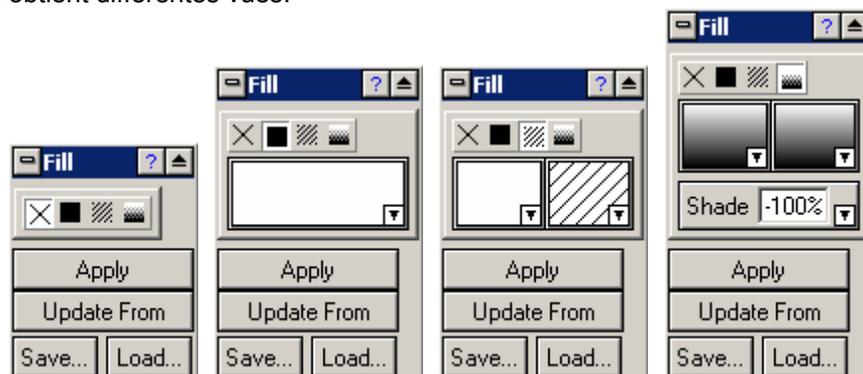
Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + P

4.11.2 Panneau Style de remplissage

Cette commande affiche le panneau **Remplissage** où vous pouvez spécifier le style par défaut pour le remplissage des rectangles, ellipses, polygones, et bulles.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la section 4.11.7.

Chaque fois que vous dessinez un nouvel objet, ACD/ChemSketch le remplit en utilisant le style par défaut qui peut être spécifié dans ce panneau. Selon le bouton sélectionné dans la partie supérieure du panneau, on en obtient différentes vues.



Ce panneau contient les options suivantes :

Elément	Fonction
Aucun	Lorsque ce bouton est choisi, les objets sont dessinés sans remplissage : ils sont transparents.
Plein	Lorsque ce bouton est choisi, les objets sont dessinés avec un remplissage plein. Vous pouvez spécifier la couleur de remplissage dans la palette de couleur au-dessous.
Motif	Lorsque ce bouton est choisi, des objets hachurés seront dessinés. Vous pouvez spécifier le prototype et la couleur des hachures dans les cases Couleur et Motif qui apparaissent.
Ombre	En choisissant ce bouton vous pouvez dessiner un objet dont le remplissage s'estompe ou s'intensifie progressivement à partir de la couleur de base jusqu'à l'une de ses teintes. Vous pouvez spécifier le prototype, la couleur, et l'intensité de l'ombre dans les cases Couleur , Motif , et Ombre qui apparaissent.
	Choisissez la couleur souhaitée dans la palette de couleurs.
	Sélectionnez le motif de hachures souhaité dans cette case.
	Sélectionnez le type d'ombre souhaité dans cette case.
Shade -100%	Dans cette case, vous pouvez spécifier le degré d'ombre du remplissage par défaut, c'est-à-dire le pourcentage de couleur de base qui change dans le remplissage.

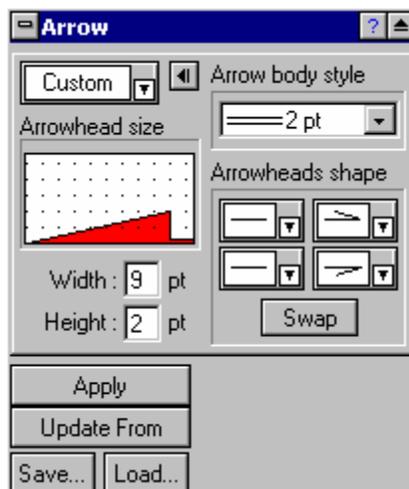
Raccourci Clavier : CTRL + SHIFT + F

4.11.3 Panneau Style de flèche

Cette commande affiche le panneau **Flèche** où vous pouvez indiquer le style de flèches par défaut.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la section 4.11.7.

Chaque fois que vous dessinez une nouvelle flèche, le style par défaut spécifié dans ce panneau lui est appliqué.



Ce panneau contient les options suivantes :

Option	Fonction
	Permet de spécifier le type de flèche par défaut. Si vous choisissez Custom , une autre partie du panneau s'affiche, vous permettant de spécifier votre propre type de flèche.
	Affiche/masque la partie droite du panneau.
Taille de tête de flèche	Le champ de prévisualisation affiche la tête de flèche qui sera appliquée à votre flèche. Vous pouvez définir la largeur et la hauteur de la tête de flèche en cliquant/glissant dans ce champ, ou en saisissant les valeurs dans les cases Width et Height .
Style du corps de flèche	Spécifiez le type de corps de flèche dans cette case.
Forme de tête de flèche	Dans cette zone, vous pouvez spécifier la forme de tête de flèche par défaut à appliquer aux extrémités gauche et droite de la flèche.
	Echange les têtes de flèche droite et gauche.

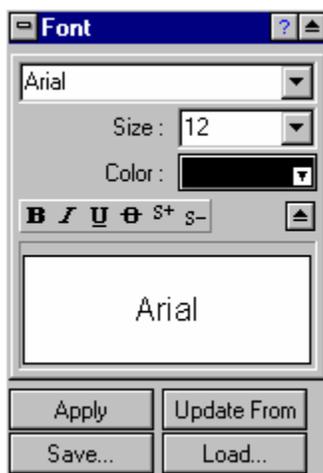
Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + A

4.11.4 Panneau Police

Cette commande affiche le panneau **Police** dans lequel vous pouvez spécifier le style par défaut du texte.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la section 4.11.7.

Chaque fois que vous saisissez un nouveau texte, ACD/ChemSketch applique le style par défaut qui peut être spécifié dans ce panneau.



Ce panneau contient les options suivantes :

Elément	Fonction
<i>Style</i>	Vous pouvez spécifier le style de police par défaut dans cette case.
Taille	Vous pouvez spécifier la taille de police par défaut dans cette case.
Couleur	Vous pouvez spécifier la couleur de police par défaut dans cette case.
B	Applique le formatage gras . Vous pouvez utiliser le bouton de formatage gras en association avec d'autres options.
<i>I</i>	Applique le formatage <i>italiques</i> . Vous pouvez utiliser le bouton de formatage italiques en association avec d'autres options.
<u>U</u>	Applique le formatage <u>souligné</u> . Vous pouvez utiliser le bouton souligner en association avec d'autres options.
A	Applique le formatage barré . Vous pouvez utiliser le bouton barrer en association avec d'autres options.
S+	Applique le formatage exposant. Vous pouvez utiliser le bouton exposant en association avec d'autres options.
S-	Applique le format indice. Vous pouvez utiliser le bouton indice en association avec d'autres options.
	Masque/affiche le champ de prévisualisation.
<i>Zone de prévisualisation</i>	Permet de visualiser l'apparence que prendront les caractères avec les options sélectionnées. Vous pouvez la masquer/l'afficher.

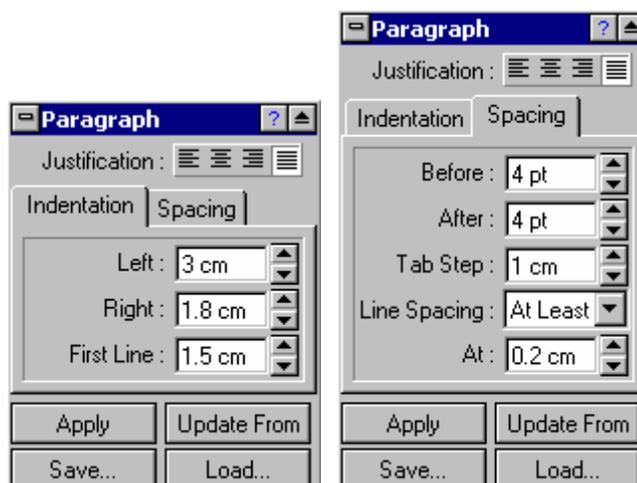
Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + T

4.11.5 Panneau Paragraphe

Cette commande affiche le panneau **Paragraphe** dans lequel vous pouvez spécifier le style par défaut des paragraphes.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la section 4.11.7.

Chaque fois que vous saisissez un nouveau texte, ACD/ChemSketch applique le style par défaut qui peut être spécifié dans ce panneau.



Ce panneau contient les options suivantes :

Option	Fonction
Justification	Dans cette zone, spécifiez l'alignement du paragraphe en cliquant sur les boutons correspondants : à gauche  , centré  , à droite  , et justifié  .
Alinéa	Dans cet onglet vous pouvez définir l'espace à partir des marges de gauche (Left) et de droite (Right), ainsi que le retrait de la première ligne (First Line).
Espace	Dans cet onglet, vous pouvez définir l'espace au-dessus (Before) et au-dessous (After) du paragraphe, ainsi que la distance entre les crans de tabulation (Tab Step) et l'espacement des lignes dans un paragraphe (Line Spacing). Notez que l'option At n'est disponible que si vous sélectionnez At Least ou Exactly dans la case Line Spacing .

Note Dans la plupart des cases, vous pouvez entrer des valeurs de différentes unités de mesure (points, pouces, millimètres, ou centimètres) en saisissant la valeur et en ajoutant l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm). La valeur sera recalculée automatiquement selon l'unité de mesure indiquée dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Général**).

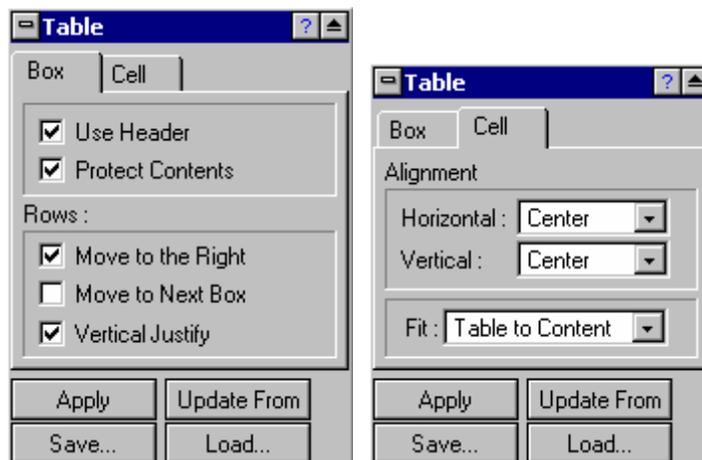
Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + R

4.11.6 Panneau Tableau

Cette commande affiche le panneau **Tableau** dans lequel vous pouvez spécifier le style par défaut des tableaux.

Note Pour n'affecter que les objets sélectionnés, sans définir de défaut, utilisez la boîte de dialogue **Panneau Objets**. Pour plus d'informations, voir la section 4.11.7.

Chaque fois que vous dessinez un nouveau tableau, ACD/ChemSketch lui applique le style par défaut qui peut être spécifié dans ce panneau.



Ce panneau contient les options suivantes :

Elément	Fonction
L'onglet Case permet de définir des options pour le tableau.	
Utiliser un en-tête	Si cette case est sélectionnée, la première ligne du tableau est insérée dans chaque case en tant qu'en-tête.
Protéger le Contenu	Si cette case est sélectionnée, le programme ne vous permet pas d'insérer ou de supprimer des objets des cellules du tableau.
Déplacer vers la droite	Si cette case est sélectionnée, les lignes du tableau sont disposées en plusieurs groupes comme des colonnes, chacune étant placée à la droite de la précédente. Les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans le premier groupe sont déplacées vers la droite du premier groupe ; les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans le second groupe sont déplacées vers la droite du second groupe, et ainsi de suite.
Déplacer vers la case suivante	Si cette case est sélectionnée, les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans la case (qui est limitée lorsque vous effectuez un premier glissé dans l'espace de travail en insérant un tableau), sont déplacées vers la case suivante.
Justifier verticalement	Si cette case est sélectionnée, le nombre de lignes dans chaque groupe (colonnes) est approximativement égal.
L'onglet Cellule permet de définir des options de cellules de tableau.	
Alignement	Permet de spécifier l'alignement horizontal et vertical du contenu d'un tableau.
Ajustement	Dans cette liste, sélectionnez la façon dont le tableau et son contenu sont ajustés l'un par rapport à l'autre : Mixed – une variété de cellules du tableau ont différents paramètres Ajustement . Table to Contents – les dimensions du tableau sont ajustées à la taille du contenu (les cellules du tableau sont réduites ou agrandies par rapport à la hauteur et à la largeur des objets insérés les plus grandes). Contents to Table – les objets insérés sont redimensionnés pour correspondre de manière adéquate aux cellules du tableau. None – le tableau conserve ses dimensions de base sans tenir compte de la taille du contenu.
Note	Pour plus d'informations sur la création de tableau dans ACD/ChemSketch, voir la section 4.7.12.

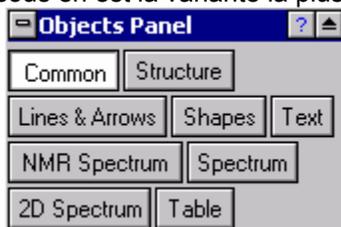
Raccourci clavier : CTRL + SHIFT + B

4.11.7 Panneau Actualiser le style d'un objet

Cette commande permet d'altérer le style de l'objet sélectionné sans affecter les paramètres par défaut. En cliquant sur cette commande (ou double cliquant sur l'objet souhaité, après avoir activé les outils

Sélectionner/Déplacer/Redimensionner  ou **Sélectionner/Déplacer/Pivoter** ) la boîte de dialogue **Panneau Objets** s'affiche, avec les options qui correspondent au type de l'objet ou des objets sélectionnés.

Le panneau peut contenir divers boutons correspondant au(x) type(s) du ou des objets sélectionnés. L'image de l'écran représentée ci-dessous en est la variante la plus riche.



Combinez vos choix dans les onglets et les listes déroulantes pour créer votre style, puis cliquez sur **Appliquer** pour utiliser les changements.

Si aucun objet n'est sélectionné dans l'espace de travail, cette commande est inactive.

Note Pour changer les défauts, utilisez les panneaux **Stylo**, **Remplissage**, **Flèche**, **Police**, **Paragraphe**, et **Tableau** (pour plus d'informations, voir les Sections 4.11.1-4.11.6).

Chaque boîte de dialogue **Panneau Objets** comprend une série de boutons aux fonctions communes:



Le tableau ci-dessous fournit la liste de ces boutons communs:

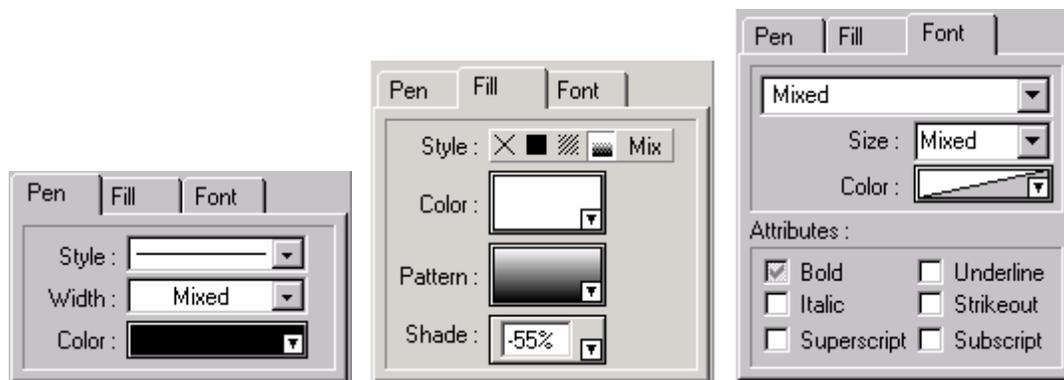
Bouton	Fonction
	Applique les paramètres de style spécifiés aux objets sélectionnés.
	Affiche la liste des styles disponibles. Choisissez le nom de style souhaité pour charger ses attributs dans le panneau.
	Définit les paramètres spécifiés comme défaut.
	Affiche la boîte de dialogue Enregistrer style utilisateur dans laquelle vous pouvez spécifier un nouveau nom de style et choisir lesquels des attributs de l'objet sélectionné doivent être inclus dans le style. Pour plus d'informations, voir la Section Error! Reference source not found..

Raccourcis :

Clavier : CTRL + SHIFT + O
Souris : Double cliquer sur l'objet sélectionné

4.11.7.1 Panneau Objets : Commun

Le bouton **Commun** affiche les onglets comportant les attributs de style communs à différents types d'objets.



Les options suivantes s'affichent :

Option	Fonction
Dans l'onglet Stylo vous pouvez spécifier l'épaisseur, le style et la couleur des traits des objets sélectionnés.	
Style	Choisissez le style de trait dans la liste.
Largeur	Spécifiez l'épaisseur de trait des objets sélectionnés dans cette case.
Couleur	Spécifiez la couleur de trait à appliquer aux objets sélectionnés dans cette case.
L'onglet Remplissage présente des options pour la spécification du style, de la couleur, et du motif de remplissage des objets sélectionnés.	
Style	Cliquez sur le bouton souhaité dans cette zone pour:
<input type="checkbox"/> Aucun	Dessiner les objets sans remplissage : ils sont transparents.
<input type="checkbox"/> Solide	Dessiner les objets avec un remplissage solide (vous pouvez spécifier la couleur de remplissage dans le champ Couleur qui apparaît).
<input type="checkbox"/> Motif	Dessiner les objets hachurés (vous pouvez spécifier le prototype et la couleur de hachure dans les champs Couleur et Motif qui apparaissent).
<input type="checkbox"/> Ombre	Dessiner des objets dont le remplissage s'estompe ou s'intensifie progressivement à partir de la couleur de base de l'un de ses tons (vous pouvez spécifier le prototype, la couleur, et l'intensité de l'ombre dans les champs Couleur , Motif , et Ombre qui apparaissent).
Couleur	Dans cette case, vous pouvez spécifier la couleur de remplissage à appliquer aux objets sélectionnés.
Motif	Dans cette case, sélectionnez le motif de hachures nécessaire, ou le type d'ombre souhaité.
Ombre	Dans cette case, vous pouvez spécifier le degré d'ombre de remplissage par défaut, c'est-à-dire le pourcentage de couleur de base changeant dans le remplissage.
Dans l'onglet Police , spécifiez les paramètres de police et de paragraphe du texte sélectionné.	
Style	Vous pouvez spécifier le style de police dans cette case.
Taille	Vous pouvez spécifier la taille de police dans cette case.
Couleur	Vous pouvez spécifier la couleur de police dans cette case.
Attributs	Sélectionner les cases applique le formatage correspondant : Gras <i>Italiques</i> <u>Souligné</u> Barré Exposant (^{Exposant}) Indice (_{Indice})
Note	Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois statuts: - <i>Désélectionnée</i> : n'applique pas l'attribut en question aux objets sélectionnés. - <i>Sélectionnée</i> : applique l'attribut en question aux objets sélectionnés. - <i>Obscurcie</i> (si l'attribut en question est différent pour chaque objet sélectionné) : ne change pas l'attribut en question dans les objets sélectionnés.

4.11.7.2 Panneau Objets : Structure

Le bouton **Structure** affiche les onglets comportant les paramètres de style à appliquer aux structures sélectionnées.

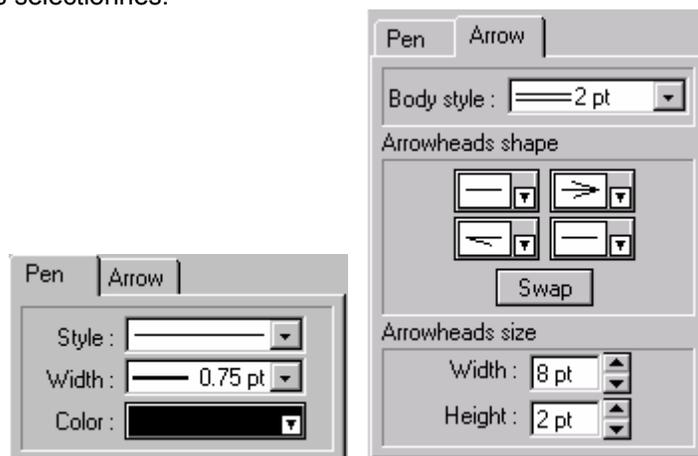


Les options suivantes sont disponibles:

Option	Fonction
Dans l'onglet Atome , spécifiez les options de police à utiliser dans les étiquettes d'atome de la ou des structures sélectionnées.	
<i>Police</i>	Dans cette case, spécifiez le style de police à appliquer aux étiquettes d'atome dans la structure sélectionnée.
Taille du Symbole	Dans cette case, spécifiez la taille de police à appliquer aux étiquettes d'atome dans la structure sélectionnée.
Couleur	Dans cette case, spécifiez la couleur de police à appliquer aux étiquettes d'atome dans la structure sélectionnée.
Style	Dans cette case, spécifiez le style des étiquettes d'atome : gras et/ou <i>italiques</i> . Le bouton enfoncé (Mix) indique que l'attribut correspondant dans les objets sélectionnés diffère (par exemple, la structure sélectionnée a des atomes de format gras et d'autres en italiques).
Dans l'onglet Liaison , spécifiez la largeur et la couleur à utiliser pour les liaisons de la ou des structures sélectionnées.	
Largeur	Dans cette case, spécifiez l'épaisseur de liaison de la structure sélectionnée. Notez que vous pouvez entrer les valeurs dans diverses unités de mesure (points, pouces, millimètres, ou centimètres) en saisissant la valeur et en ajoutant l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm). La valeur sera automatiquement recalculée selon l'unité indiquée dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Général).
Couleur	Dans cette case, spécifiez la couleur à appliquer aux liaisons de la structure sélectionnée.

4.11.7.3 Panneau Objets : Traits et Flèches

Le bouton **Traits & Flèches** affiche des onglets comportant les paramètres de style à appliquer aux objets linéaires et aux flèches sélectionnés.



Les options suivantes sont disponibles:

Option	Fonction
Dans l'onglet Stylo , vous pouvez spécifier l'épaisseur, le style, et la couleur de trait des objets linéaires	

Option	Fonction
	sélectionnés.
Style	Choisissez le style de trait dans cette liste.
Largeur	Spécifiez l'épaisseur de trait des objets sélectionnés dans cette case.
Couleur	Spécifiez la couleur de trait à appliquer aux objets sélectionnés dans cette case.
Dans l'onglet Arrow , vous pouvez spécifier le style des têtes et corps de flèche des flèches sélectionnées.	
Style de Corps	Spécifiez le type de corps de flèche par défaut dans cette case.
Forme de tête de flèche	Dans cette zone, spécifiez la forme des têtes de flèche par défaut à appliquer aux deux extrémités de la flèche.
Swap	Permute les têtes de flèche.
Taille des têtes de flèche	Dans cette zone, spécifiez la largeur et la hauteur de la tête de flèche.

4.11.7.4 Panneau Objets : Formes

Le bouton **Formes** affiche les onglets comportant les paramètres de style à appliquer aux éléments d'enclos de remplissage sélectionnés, tels que les rectangles, les ellipses, les polygones et les bulles.



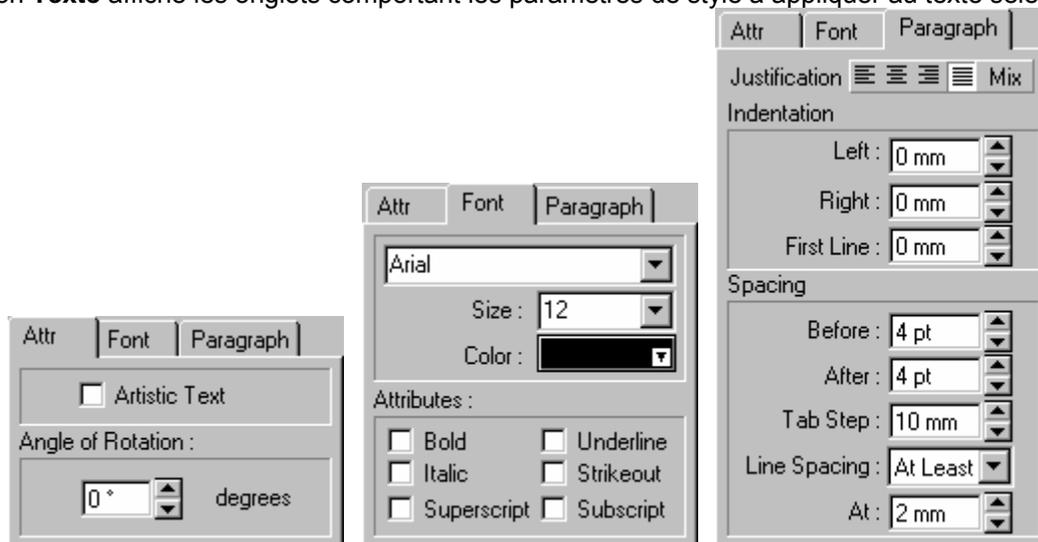
Les options suivantes sont disponibles:

Option	Fonction
Dans l'onglet Stylo vous pouvez spécifier l'épaisseur, le style et la couleur des traits des objets sélectionnés. Les paramètres de cet onglet seront appliqués à tous les rectangles, ellipses, polygones, et bulles sélectionnés.	
Style	Choisissez le style de trait dans la liste.
Largeur	Spécifiez l'épaisseur de trait des objets sélectionnés dans cette case.
Couleur	Spécifiez la couleur de trait à appliquer aux objets sélectionnés dans cette case.
Dans l'onglet Remplissage vous pouvez spécifier le style et la couleur de remplissage des objets sélectionnés. Ces paramètres seront appliqués à tous les rectangles, ellipses, polygones, et bulles sélectionnés.	
Style	Cliquez sur le bouton souhaité dans cette zone pour:
<input type="checkbox"/> Aucun	Dessiner les objets sans remplissage : ils sont transparents.
<input type="checkbox"/> Plein	Dessiner les objets avec un remplissage plein (vous pouvez spécifier la couleur de remplissage dans le champ Couleur qui apparaît).
<input type="checkbox"/> Motif	Dessiner les objets hachurés (vous pouvez spécifier le prototype et la couleur de hachure dans les champs Couleur et Motif qui apparaissent).
<input type="checkbox"/> Ombre	Dessiner des objets dont le remplissage s'estompe ou s'intensifie progressivement à partir de la couleur de base de l'un de ses tons (vous pouvez spécifier le prototype, la couleur, et l'intensité de l'ombre dans les champs Couleur , Motif , et Ombre qui apparaissent).
Couleur	Dans cette case, vous pouvez spécifier la couleur de remplissage à appliquer aux objets sélectionnés.
Motif	Dans cette case, sélectionnez le motif de hachures nécessaire, ou le type d'ombre souhaité.
Ombre	Dans cette case, vous pouvez spécifier le degré d'ombre de remplissage par défaut, c'est-à-dire le pourcentage de couleur de base changeant dans le remplissage.
Dans l'onglet Ombre vous pouvez spécifier la taille et la couleur de l'ombre à appliquer aux objets sélectionnés. Ces paramètres seront appliqués à tous les rectangles, ellipses, polygones, et bulles sélectionnés.	
On / Off / Mixed	Ajoute/Supprime l'ombre des formes sélectionnées. Spécifiez la taille et la couleur de l'ombre dans les autres cases. L'option Mixed sélectionnée indique que l'attribut correspondant est différent dans chaque objet sélectionné (par exemple, une forme sélectionnée possède une

Option	Fonction
	ombre alors qu'une autre n'en a aucune).
Couleur	Vous pouvez spécifier la couleur de l'ombre dans la palette de couleurs.
dX / dY	Dans ces cases, vous pouvez spécifier la position d'une ombre par rapport à l'objet le long des axes X et Y. Pour entrer la valeur en points, pouces, millimètres, ou centimètres, saisissez la valeur et ajoutez l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple 5 pt. La valeur sera automatiquement recalculée selon l'unité indiquée dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Général).

4.11.7.5 Panneau Objets : Texte

Le bouton **Texte** affiche les onglets comportant les paramètres de style à appliquer au texte sélectionné.



Les options suivantes sont disponibles:

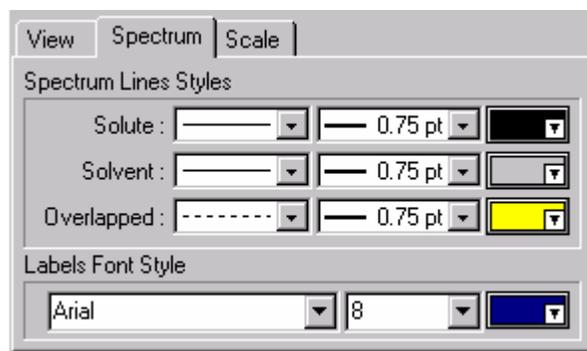
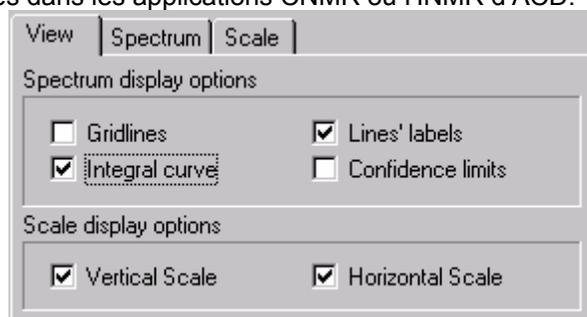
Option	Fonction
L'onglet Attr permet de	transformer le texte formaté sélectionné en texte artistique et de le faire pivoter.
Text Artistique	Sélectionnez cette case pour transformer le texte Formaté sélectionné en texte Artistique. Au contraire du texte formaté, le texte artistique peut être modifié comme un objet graphique ordinaire (étiré, tourné, etc.).
Angle de rotation	Permet de spécifier l'angle de rotation dans lequel vous souhaitez faire pivoter le texte sélectionné.
Dans l'onglet Police , spécifiez les paramètres de police du texte sélectionné.	
Style	Spécifiez le style de police dans cette case.
Taille	Spécifiez la taille de police dans cette case.
Couleur	Spécifiez la couleur de police dans cette case.
Attributs	Sélectionner les cases applique le formatage correspondant : Gras <i>Italique</i> <u>Souligné</u> Barré Exposant (^{Exposant}) Indice (_{Indice})
Dans l'onglet Paragraphe , spécifiez le style des paragraphes du texte sélectionné.	
Justification	Dans cette zone, spécifiez l'alignement du paragraphe en cliquant sur les boutons correspondants: à gauche [L], centré [C], à droite [R], et justifié [J]. Le texte sera aligné par rapport aux retraits actuels, qui peuvent être spécifiés dans la zone Indentation au-dessous. Le bouton Mix enfoncé ([Mix]) indique que le retrait des objets sélectionnés diffère et ne sera pas modifié.
Retrait	Dans cette zone, vous pouvez spécifier le retrait à gauche et à droite du paragraphe dans

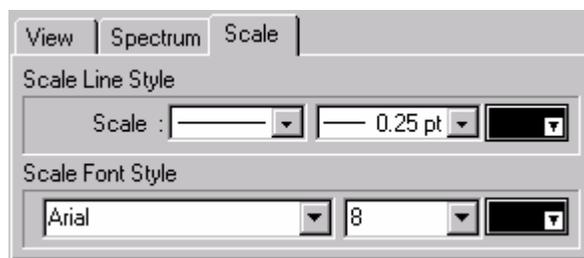
Option	Fonction
	la case de texte, ainsi que le retrait de la première ligne du paragraphe.
Espacement	Dans cette zone, vous pouvez définir la quantité d'espace au-dessus (Before) et au-dessous (After) du paragraphe, ainsi que la distance entre les pas de tabulation (Tab step), et l'espacement entre les lignes d'un paragraphe (Line Spacing). Notez que l'option At n'est disponible que si vous sélectionnez At Least ou Exactly dans la case Line Spacing . Dans la plupart des cases, vous pouvez entrer les valeurs dans divers unités de mesure (points, pouces, millimètres, ou centimètres) en saisissant la valeur et en ajoutant l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm). La valeur sera automatiquement recalculée selon l'unité indiquée dans la boîte de dialogue Préférences (onglet Général).
Note	Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois statuts : <ul style="list-style-type: none"> - <i>Désélectionnée</i> : n'applique pas l'attribut en question aux objets sélectionnés. - <i>Sélectionnée</i> : applique l'attribut en question aux objets sélectionnés. - <i>Obscurcie</i> (si l'attribut en question est différent pour chaque objet sélectionné) : ne change pas l'attribut en question dans les objets sélectionnés.

Les unités de mesure dans la plupart des cases correspondent à celles définies dans l'onglet **Général** de la boîte de dialogue **Préférences**. Pour entrer la valeur en points/pouces/millimètres/centimètres, saisissez la valeur et ajoutez l'unité souhaitée (pt/in/mm/cm), par exemple *5 pt*. La valeur sera recalculée dans l'unité de mesure correspondante.

4.11.7.6 Panneau Objets : Spectre NMR

Le bouton **Spectre NMR** affiche les onglets comportant des paramètres de style à appliquer aux spectres 1D NMR sélectionnés copiés dans les applications CNMR ou HNMR d'ACD.



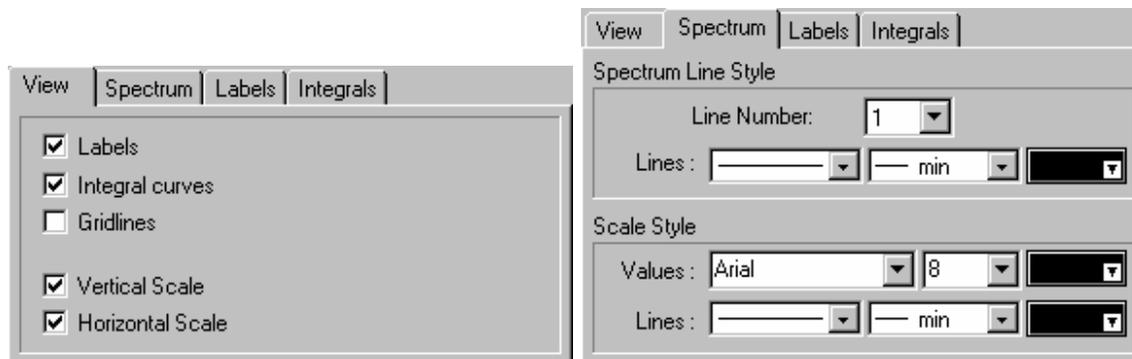


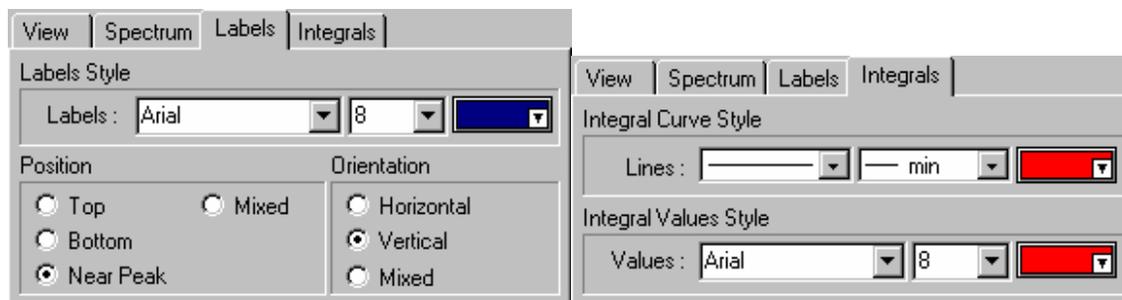
Les options suivantes sont disponibles:

Option	Fonction
Dans l'onglet Visualiser , spécifiez les objets à afficher avec le spectre.	
Options d'affichage de spectre	In this area, select the check boxes of the elements to be displayed on the spectrum: gridlines, integral curves, lines' labels, confidence limits. If several spectra are selected on the ChemSketch page, the check box of an element can be dimmed, i.e., the state of the current element differs for these spectra.
Options d'affichage d'échelle	Dans cette zone, sélectionnez/désélectionnez les cases the Echelle Verticale / Echelle Horizontale pour afficher/masquer les échelles de spectre correspondantes. Si plusieurs spectres sont sélectionnés sur la page ChemSketch, la case d'un élément peut être obscurcie, c'est-à-dire que l'état de l'élément actuel diffère dans ces spectres.
Dans l'onglet Spectre , spécifiez le style de traits de spectre et le style de police des étiquettes.	
Styles de traits de spectre	Dans cette zone, spécifiez le style, l'épaisseur, et la couleur à appliquer aux traits de spectre (soluté, solvant, et traits se chevauchant).
Style de police des étiquettes	Dans cette zone, spécifiez le style, la taille, et la couleur des étiquettes de spectre.
Dans l'onglet Echelle , spécifiez le style de trait d'échelle et le style de police des étiquettes.	
Style de trait d'échelle	Dans cette zone, spécifiez le style, l'épaisseur, et la couleur à appliquer aux traits d'échelle.
Style de police d'échelle	Dans cette zone, définissez le style de police, la taille, et la couleur des valeurs de l'échelle.

4.11.7 Panneau Objets : Spectre

Le bouton **Spectre** affiche les onglets comportant les paramètres de style des spectres copiés dans SpecManager ACD:





Les options suivantes sont disponibles :

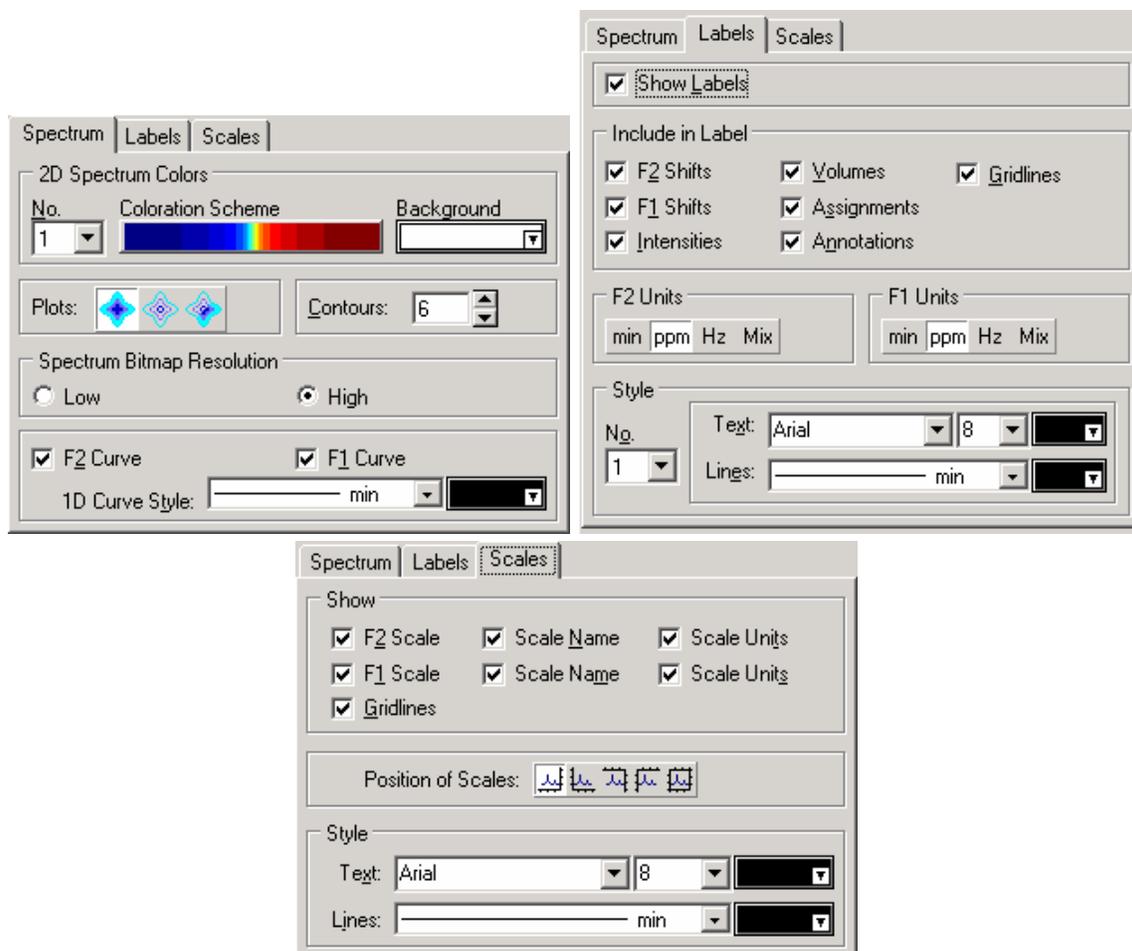
Option	Fonction
	Dans l'onglet Visualiser , spécifiez les objets à afficher avec le spectre: étiquettes, courbe intégrale, lignes de quadrillage, échelle verticale, et échelle horizontale.
	Dans l'onglet Spectre , spécifiez le style du spectre et des échelles.
Styles de traits de spectre	Dans cette zone, spécifiez le nombre ordinal du trait dont le style, la largeur, et la couleur doivent être spécifiés dans les cases Lines au-dessous.
Style d'échelle	Dans cette zone, définissez le style de police, la taille, et la couleur des valeurs de l'échelle (cases Values), et spécifiez également le style, la largeur, et la couleur des traits d'échelle (cases Lines).
	Dans l'onglet Étiquettes , spécifiez le style, la position, et l'orientation des étiquettes de pic.
Style d'étiquettes	Dans cette zone, spécifiez le style, la taille, et la couleur des étiquettes de spectre.
Position	Dans cette zone, spécifiez la position des étiquettes de pic sur le spectre. L'option Mixed sélectionnée indique que la position des étiquettes de plusieurs spectres sélectionnés diffère et ne sera pas modifiée.
Orientation	Dans cette zone, spécifiez l'orientation des étiquettes de pic. L'option Mixed sélectionnée indique que l'orientation des étiquettes de plusieurs spectres sélectionnés diffère et ne sera pas modifiée.
	Dans l'onglet Intégrals , spécifiez les styles de trait d'intégrale et du style de valeur d'intégrale.

Note Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois statuts :

- *Désélectionnée* : n'applique pas l'attribut en question aux objets sélectionnés.
- *Sélectionnée* : applique l'attribut en question aux objets sélectionnés.
- *Obscurcie* (si l'attribut en question est différent pour chaque objet sélectionné) : ne change pas l'attribut en question dans les objets sélectionnés.

4.11.7.8 Panneau Objets : Spectre 2D

Le bouton **Spectre 2D** affiche les onglets comportant les paramètres de style à appliquer aux spectres sélectionnés copiés dans SpecManager ACD.



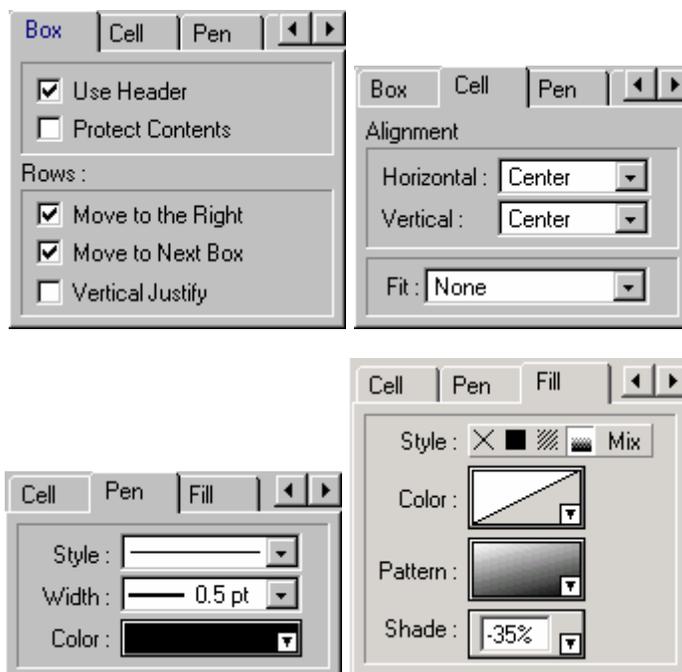
Les options suivantes sont disponibles:

Option	Function
Dans l'onglet Spectre , spécifiez le style de spectre 2D et de courbes 1D.	
Couleurs Spectre 2D	Dans cette zone, spécifiez les paramètres de couleur des pics du spectre et de l'arrière-plan actuels. En cliquant dans la case Schéma de Coloration , une boîte de dialogue apparaît et vous permet de choisir le schéma de coloration (Polychromatique ou Dichromatique) que vous souhaitez appliquer, définir le gradient de couleur supplémentaire pour une meilleure visualisation du spectre, et spécifier les couleurs à utiliser pour l'affichage des couches de tracé. Vous pouvez sélectionner les couleurs de dix spectres juxtaposés maximum: dans la case No. , choisissez le numéro de spectre et définissez les couleurs souhaitées. L'utilisation de cette option vous aide à distinguer les spectres NMR 2D rassemblés.
Tracés et Contours	Dans ces zones, spécifiez une forme du tracé à utiliser dans la représentation du spectre. Si plusieurs spectres sont sélectionnés et qu'ils sont représentés avec différents types de tracé, le bouton Mixed Plot est enfoncé. Dans Gradient Contour Plot et Contour Plot vous pouvez également définir le nombre de Contours à utiliser pour chaque affichage de pic.
Résolution Bitmap Spectre	Dans cette zone, choisissez entre les résolutions Low et High selon vos souhaits. Notez qu'une résolution plus élevée fournit une meilleure qualité d'image, mais représente également une taille de fichier plus importante.
<i>Spectres 1D</i>	Dans cette zone, sélectionnez les cases des spectres 1D qui doivent être insérés avec le spectre 2D. Notez que ces cases deviennent disponibles lorsque vous avez des spectres 1D attachés.

Option	Function
	De plus, dans cette zone vous pouvez spécifier la couleur et la largeur des traits de spectres 1D.
Dans l'onglet Étiquettes , spécifiez les composés des étiquettes, les unités de mesure, la couleur et le style du texte et des traits des étiquettes.	
Afficher Étiquettes	Sélectionnez cette case pour afficher les étiquettes sur le spectre. Dans la section au-dessous vous pouvez spécifier les éléments à inclure dans une étiquette. Si plusieurs spectres sont sélectionnés dans la page ChemSketch, cette case sera obscurcie, c'est-à-dire que l'état des éléments diffère dans ces spectres.
Inclure dans l'étiquette	Dans cette zone, sélectionnez les cases des éléments à inclure dans les étiquettes de pics: alternances F2 / F1, intensités, volumes, transferts, annotations, et quadrillages. Si plusieurs spectres sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un élément sera obscurcie, c'est-à-dire que l'état de l'élément actuel diffère dans ces spectres.
Unités F2 / Unités F1	Dans ces zones, spécifiez les unités de mesure des échelles F2 et F1. Le bouton Mix enfoncé indique que les unités de mesure dans plusieurs spectres sélectionnés diffèrent et ne seront pas modifiées.
Style	Dans cette zone, vous pouvez spécifier des préférences d'affichage pour dix spectres juxtaposés maximum. Dans la case No. , sélectionnez le numéro du spectre, puis sélectionnez les attributs de style appropriés (style de police d'étiquette, taille, et couleur, ainsi que le style et la couleur des traits) dans les cases sur la droite.
Dans l'onglet Echelles , spécifiez les unités de mesure, la position des échelles, la couleur et le style du texte et des traits des échelles.	
Afficher	Dans cette zone, sélectionnez les cases des éléments qui doivent apparaître avec le spectre. Si plusieurs spectres sont sélectionnés sur la page ChemSketch, la case d'un élément peut être obscurcie, c'est-à-dire que l'état de l'élément actuel diffère dans ces spectres.
Position des Echelles	Dans cette zone, sélectionnez l'emplacement des axes: droit et bas; gauchet et bas; droit et haut; gauche et haut. Si plusieurs spectres sont sélectionnés et qu'ils ont différents affichages d'échelles, le bouton Mixed Scales est activé.
Style	Dans cette zone, définissez le style de police, la taille, et la couleur des valeurs d'échelle (cases Texte); spécifiez également le style et la couleur des traits d'échelle (cases Lines).

4.11.7.9 Panneau Objets : Tableau

Le bouton **Tableau** affiche les onglets comportant des paramètres de style de tableau:



Les options suivantes sont disponibles:

Option	Fonction
Dans l'onglet Case , spécifiez des options de tableau générales comprenant les diverses dispositions des lignes du tableau.	
Utiliser en-tête	Si cette case est sélectionnée, la première ligne du tableau est insérée dans chaque case comme en-tête.
Protéger le Contenu	Si cette case est sélectionnée, le programme ne vous autorise pas à insérer ou supprimer des objets des cellules du tableau, jusqu' à ce que cette case soit désélectionnée.
Déplacer vers la droite	Si cette case est sélectionnée, les lignes du tableau sont disposées en plusieurs groupes comme des colonnes, chacune étant placée à droite de la précédente. Les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans le premier groupe sont déplacées vers la droite du premier groupe ; les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans le second groupe sont déplacées vers la droite du second groupe, et ainsi de suite.
Déplacer vers la case suivante	Si cette case est sélectionnée, les lignes du tableau qui ne tiennent pas dans la case (qui est limitée lorsque vous effectuez un premier glissé dans l'espace de travail en insérant un tableau), sont déplacées vers la case suivante.
Justifier Verticalement	Si cette case est sélectionnée, le nombre de lignes dans chaque groupe (colonne) est approximativement égal.
Dans l'onglet Cellule , vous pouvez définir des options pour l'alignement et la manipulation du contenu à l'intérieur du tableau.	
Alignement	Dans cette zone, vous pouvez spécifier l'alignement horizontal et vertical du contenu d'un tableau.
Ajuster	Dans cette liste, sélectionnez la façon dont le tableau et son contenu sont ajustés l'un par rapport à l'autre : Mixed – une variété de cellules du tableau ont différent paramètres Fit . Table to Contents – les dimensions du tableau sont ajustées à la taille du contenu (les cellules du tableau sont réduites ou agrandies par rapport à la hauteur et à la largeur des objets insérés les plus grandes). Contents to Table – les objets insérés sont redimensionnés pour correspondre de manière adéquate aux cellules du tableau. None – le tableau conserve ses dimensions de base sans tenir compte de la taille du contenu.
Dans l'onglet Stylo , spécifiez le style, la largeur, et la couleur des traits des bordures du tableau.	
Dans l'onglet Remplissage , spécifiez le style et la couleur de remplissage des cellules du tableau.	
Style	Dans cette zone, cliquez sur le bouton souhaité pour:
<input checked="" type="checkbox"/> Aucun	Dessiner les objets sans remplissage : ils sont transparents.

Option	Fonction
<input type="checkbox"/> Solide	Dessiner les objets avec un remplissage plein (vous pouvez spécifier la couleur de remplissage dans le champ Couleur qui apparaît).
<input type="checkbox"/> Motif	Dessiner les objets hachurés (vous pouvez spécifier le prototype et la couleur de hachure dans les champs Couleur et Motif qui apparaissent).
<input type="checkbox"/> Ombre	Dessiner des objets dont le remplissage s'estompe ou s'intensifie progressivement à partir de la couleur de base de l'un de ses tons (vous pouvez spécifier le prototype, la couleur, et l'intensité de l'ombre dans les champs Couleur , Motif , et Ombre qui apparaissent).
Couleur	Dans cette case, vous pouvez spécifier la couleur de remplissage à appliquer aux cellules du tableau.
Motif	Dans cette case, sélectionnez le motif nécessaire pour les hachures, ou le type d'ombre souhaité.
Ombre	Dans cette case, vous pouvez spécifier le degré d'ombre de remplissage par défaut, c'est-à-dire le pourcentage de couleur de base changeant dans le remplissage.

Note Si plusieurs objets sont sélectionnés dans la page ChemSketch, la case d'un attribut peut avoir trois statuts :

- *Désélectionnée* : n'applique pas l'attribut en question aux objets sélectionnés.
- *Sélectionnée* : applique l'attribut en question aux objets sélectionnés.
- *Obscurcie* (si l'attribut en question est différent pour chaque objet sélectionné) : ne change pas l'attribut en question dans les objets sélectionnés.

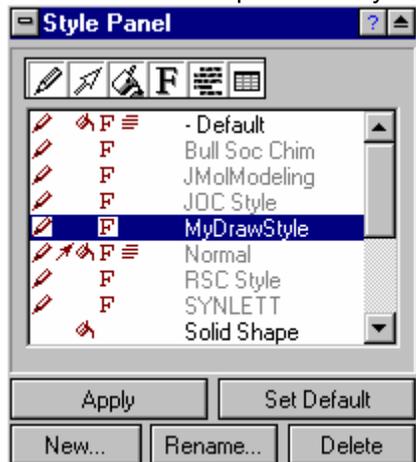
4.11.8 Panneau Organiseur de style

Cette commande vous permet de gérer les styles. Elle affiche la boîte de dialogue **Panneau de Style**, contenant une liste de tous les styles enregistrés et des attributs (stylo, flèche, remplissage, police, paragraphe et tableau) inclus dans chaque style.

En utilisant ce panneau vous pouvez appliquer n'importe quel style existant à l'objet sélectionné, définir un des styles de la liste comme style par défaut, renommer ou supprimer un style existant, et enregistrer les paramètres par défaut actuels en tant que nouveau style.

Si vous choisissez un ou plusieurs attributs dans la ligne dans la partie supérieure du panneau, la liste des styles comportant les attributs choisis apparaîtra.

Choisissez tous les attributs pour visualiser la liste complète des styles.



Ce panneau contient les options suivantes:

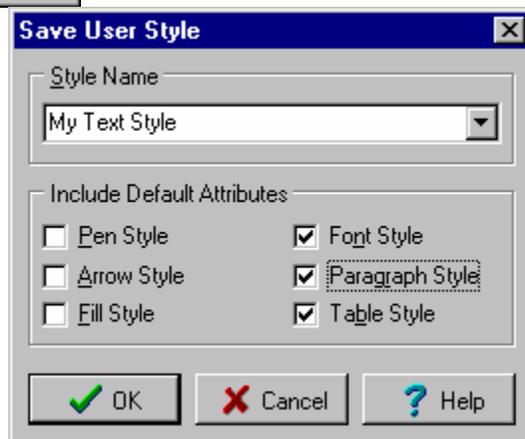
Option	Fonction
--------	----------

Option	Fonction
<i>Attributs</i>	<p>Cliquez sur le bouton souhaité pour visualiser les styles comportant l'attribut correspondant. Les attributs suivants sont disponibles:</p> <p> — Stylo (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p> <p> — Flèche (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p> <p> — Remplissage (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p> <p>F — Police (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p> <p> — Paragraphe (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p> <p> — Tableau (pour plus d'informations sur cet attribut, voir la Section Error! Reference source not found.)</p>
<i>Liste de Styles</i>	Affiche une liste de tous les styles et attributs enregistrés (stylo, flèche, remplissage, police, paragraphe et tableau) compris dans chaque style. Cliquez sur le style pour l'afficher en surbrillance. Vous pouvez ensuite supprimer, renommer, appliquer, et définir en tant que par défaut le style surbrillant. Les styles prédéfinis s'affichent en gris dans la liste et ne peuvent être modifiés ou supprimés.
	Applique le style affiché en surbrillance dans la liste aux objets sélectionnés.
	Définit le style affiché en surbrillance comme défaut.
	Affiche la boîte de dialogue Enregistrer Style Utilisateur , dans laquelle vous pouvez spécifier le nom de votre style et de choisir les attributs à y inclure. Pour plus d'informations, voir la Section suivante.
	Affiche la boîte de dialogue Renommer le Style , dans laquelle vous pouvez spécifier un nouveau nom pour un style existant. Notez que les styles prédéfinis qui apparaissent en gris dans la liste de styles ne peuvent être renommés.
	Permet de supprimer le style affiché en surbrillance dans la liste. Notez que les styles prédéfinis qui apparaissent en gris dans la liste de styles ne peuvent être supprimés.

4.11.8.1 Boîte de dialogue Enregistrer le style utilisateur

Dans cette boîte de dialogue, vous pouvez spécifier les attributs par défaut actuels à enregistrer en tant que nouveau style défini par l'utilisateur.

Vous pouvez ouvrir cette boîte de dialogue à partir de n'importe lequel des panneaux de style par défaut (menu **Outils**) en cliquant sur **Enregistrer**  , ou à partir de la boîte de dialogue **Panneau de Style** en cliquant sur **Nouveau** .



Cette boîte de dialogue contient les options suivantes :

Elément	Fonction
Nom de Style	Spécifiez un nouveau nom de style ou choisissez-le dans la liste et modifiez-le.
Style du Stylo	Sélectionnez cette case pour inclure les attributs de style de stylo par défaut actuels (spécifiés dans le panneau Stylo) dans le style défini par l'utilisateur.
Style de Flèche	Sélectionnez cette case pour inclure les attributs de style de flèche par défaut actuels (spécifiés dans le panneau Flèche) dans le style défini par l'utilisateur.
Style de Remplissage	Sélectionnez cette case pour inclure les attributs de style de remplissage par défaut actuels (spécifiés dans le panneau Remplissage) dans le style défini par l'utilisateur.
Style de Police	Sélectionnez cette case pour inclure les attributs de style de police par défaut actuels (spécifiés dans le panneau Police) dans le style défini par l'utilisateur.
Style de Paragraphe	Sélectionnez cette case pour inclure les attributs de style de paragraphe par défaut actuels (spécifiés dans le panneau Paragraphe) dans le style défini par l'utilisateur.
OK	Cliquez sur ce bouton pour enregistrer les attributs spécifiés dans le style utilisateur sous un nom spécifique.
Annuler	Cliquez sur ce bouton pour fermer la boîte de dialogue sans enregistrer les changements que vous avez effectués.

4.11.9 Générer sous-menu

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce sous-menu, se référer aux Sections 3.12.16-3.12.24.

4.11.10 Rechercher structure - **version commerciale uniquement !**

Pour des informations détaillées sur cette commande, se référer à la Section 3.12.25.

4.12 Menu Objet

Les commandes de ce menu vous permettent de contrôler l'emplacement des objets graphiques sur la page. Ces commandes regroupent, empilent, pivotent, et alignent les objets sélectionnés, relient les traits et convertissent les objets sélectionnés en traits de forme variable. La plupart des commandes de ce menu sont également disponibles dans la barre d'outils Edition (voir la Section 4.6).

4.12.1 Regrouper/Séparer

Cette commande vous permet de :

- Regrouper tous les objets sélectionnés ensemble de sorte qu'ils puissent être sélectionnés et manipulés comme un simple objet.
- Diviser le groupe sélectionné en ses différents objets individuels. Si vous avez groupé plusieurs groupes ensemble, la commande **Séparer** divise un niveau de groupement à la fois.
- Placer dans/extraire l'objet sélectionné de la cellule du tableau sélectionnée.

Note Les commandes **Regrouper** et **Séparer** se remplacent mutuellement automatiquement dans le menu **Objets** selon la sélection en cours.

Cette commande n'est pas disponible s'il y a seulement un objet sélectionné, ou si aucun objet n'est sélectionné dans l'espace de travail.

Raccourcis :

Clavier : CTL + G

Barre d'outils Edition : 

4.12.2 Amener vers l'avant

Cette commande amène les objets d'arrière-plan sélectionnés au premier plan. Sélectionnez le ou les objets et choisissez cette commande. Pour inverser cette commande, utilisez la commande **Envoyer vers l'arrière**.

Pour sélectionner les objets qui sont complètement couverts par les objets du premier plan, vous pouvez appliquer la commande **Envoyer vers l'arrière** aux objets devant eux.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + F

Barre d'outils Edition : 

4.12.3 Envoyer vers l'arrière

Utilisez cette commande pour déplacer les objets du premier plan vers l'arrière-plan. Sélectionnez les objets et choisissez cette commande. Pour inverser cette commande, utilisez la commande **Envoyer vers l'avant**.

Raccourcis :

Clavier : CTRL + K

Barre d'outils Edition : 

4.12.4 Renverser de gauche à droite

Cette commande fait pivoter les objets sélectionnés de gauche à droite.

Si la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée, vous pouvez appliquer certains des outils de sélection, de rotation, et de renversement disponibles dans la barre d'outils Structure aux objets créés dans le mode Dessin.

Raccourci :

Barre d'outils Edition : 

4.12.5 Renverser de haut en bas

Cette commande vous permet de faire pivoter le ou les objets sélectionnés le long de l'axe horizontal.

Si la case **Select Graphics** dans la boîte de dialogue **Préférences** (onglet **Structure**) est sélectionnée, vous pouvez appliquer certains des outils de sélection, de rotation, et de renversement disponibles dans la barre d'outils Structure aux objets créés dans le mode Dessin.

Raccourci :

Barre d'outils Edition : 

4.12.6 Pivoter de 90°

Cette commande fait pivoter les objets sélectionnés dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, à 90°.

Astuce Vous pouvez également utiliser l'outil **Sélectionner/Déplacer/Pivoter**  pour faire pivoter les objets (pour plus d'informations, voir la Section 4.6.2).

Raccourci :

Barre d'outils Edition : 

4.12.7 Aligner horizontalement > Gauche/Centre/Droite

Ces commandes vous permettent d'aligner horizontalement des objets sélectionnés à gauche, au centre, ou à droite.

- Si un seul objet est sélectionné, il est aligné sur les marges du centre, de gauche ou de droite de toute la page.
- Si un groupe d'objets est sélectionné, les objets sont alignés sur les bords du centre, de la gauche ou de la droite du groupe entier, les uns par rapport aux autres.

Raccourci :

Barre d'outils Edition :   

4.12.8 Aligner verticalement > Haut/Centre/Bas

Ces commandes vous permettent d'aligner verticalement des objets sélectionnés au centre, en haut ou en bas.

- Si un seul objet est sélectionné, il est aligné sur la marge du centre, du haut ou du bas de la page.
- Si un groupe d'objets est sélectionné, les objets sont alignés sur le bord du centre, du haut ou du bas de tout le groupe.

Raccourci :

Barre d'outils Edition :   

4.12.9 Ajuster horizontalement

Cette commande étire le ou les objets sélectionnés horizontalement vers les marges de gauche et de droite de la page.

Au contraire des options **Ajuster Tout**  et **Ajuster la Sélection**  qui changent seulement l'affichage des objets, cette commande change la taille réelle des objets.

4.12.10 Ajuster verticalement

Cette commande étire le ou les objets sélectionnés verticalement vers les marges du haut et du bas de la page.

Au contraire des options **Ajuster Tout**  et **Ajuster la Sélection**  qui changent seulement l'affichage des objets, cette commande change la taille réelle des objets.

4.12.11 Convertir en traits de forme variable

Cette commande convertit les objets sélectionnés dessinés avec les outils **Rectangle** , **Rectangle arrondi** , **Arc** , et **Ellipse**  en traits de forme variable, pour que vous puissiez modifier leur forme en utilisant l'outil **Edit Nodes** .

Raccourci clavier : CTRL+Y

4.12.12 Relier les traits

Cette commande dessine des traits de connexion entre deux ou plus de deux objets graphiques dessinés avec les outils **Trait** , **Courbe** , **Flèche**  ou **Trait de forme variable** . Les points d'extrémité les plus proches des objets sélectionnés sont connectés.

Pour pouvoir appliquer cet outil à des objets dessinés avec l'outil **Arc** , vous pouvez convertir les arcs dessinés en traits de forme variable en utilisant la commande **Convertir en trait de forme variable** dans le menu **Objets**.

4.13 Menu Modèles

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la Section 3.13.

4.14 Menu Options

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la Section 3.14.

4.15 Menu Documents

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la Section 3.15.

4.16 Menu I-Lab

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la Section 3.17.

4.17 Menu ACD/Labs

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la Section 3.18.

4.18 Menu Aide

Pour des informations détaillées sur les commandes disponibles dans ce menu, se référer à la section 3.19.

Annexe A. Lancer ACD/ChemSketch à partir de la ligne de commande

Il peut y avoir des circonstances (comme une sollicitation provenant d'un autre programme) dans lesquelles ACD/ChemSketch doit être lancé à partir de la ligne de commande au lieu de l'interface de l'utilisateur graphique Windows. Le tableau ci-dessous présente les spécificités de la commande :

Commande	Cette commande...
<code>chemsk</code>	démarre ACD/ChemSketch.
<code>chemsk PathFilename.SupportedFormat</code> où <i>PathFilename.SupportedFormat</i> peut être un fichier de n'importe quel format compatible avec la version en cours d'utilisation de ChemSketch (pour une liste des formats compatibles, voir la Section 3.9.8).	ouvre le fichier spécifié dans la fenêtre ChemSketch (si cela est possible)
Remarque	La longueur de la ligne de commande est limitée à 260 caractères.

Par exemple, la ligne suivante :

```
chemsk e:\examples\poster.sk2
```

ouvre POSTER.SK2 à partir de E:\EXAMPLES dans la fenêtre ChemSketch;

et la ligne suivante

```
chemsk c:\temp\borneol.mol
```

place une structure provenant de BORNEOL.MOL située dans C:\TEMP dans une nouvelle page dans ACD/ChemSketch.

Annexe B. Propriétés calculées

Vue d'ensemble

En plus du potentiel d'ACD/ChemSketch en matière de dessin, ce programme offre la possibilité d'établir des prédictions de nombreuses propriétés de vos composés, telles que:

- o Poids moléculaire
- o Pourcentage de composition
- o Réfractivité Molaire
- o Volume molaire
- o Parachore
- o Indice de réfraction
- o Tension de surface
- o Densité
- o Constante diélectrique
- o Polarisabilité
- o Masse mono isotopique, nominale et moyenne

Ce chapitre décrit les manières simples de calculer ces propriétés. Les algorithmes pour le calcul de ces propriétés y sont décrits brièvement. Il propose un résumé de la convergence des valeurs calculées par rapport aux valeurs expérimentales pour plusieurs centaines de composés.

Algorithmes pour le calcul des propriétés

Au coeur de l'algorithme de calcul additif-constitutif de toutes les propriétés physico-chimiques d'ACD/ChemSketch, se trouve l'idée qu'il est possible d'estimer ces propriétés en utilisant des incréments atomiques additifs ou de groupe. Le poids moléculaire (MW), lui-même simple à calculer, mis à part, on peut classer les algorithmes en trois grands groupes :

- Propriétés macroscopiques basiques: Volume Molaire (MV), Réfractivité Molaire (MR), et Parachore (P_r);
- Propriétés macroscopiques dérivées: densité (d), indice de réfraction (n), et tension de surface (γ); et
- Constante diélectrique ϵ (Permittivité).

Les propriétés macroscopiques basiques telles que le Volume Molaire (MV), la Réfractivité Molaire (MR), et le Parachore (P_r), sont calculées avant tout pour la structure entrée. Les incréments additifs atomiques de tels algorithmes dépendent des liaisons (simple, double, aromatique, *etc.*) de cet atome et des atomes voisins. ACD/ChemSketch analyse rapidement la structure entrée pour déterminer la classe de chaque atome, c'est à dire le fait de savoir s'il est cyclique, aromatique, aliphatique, *etc.*

Les algorithmes de prédiction de la densité (d), de l'indice de réfraction (n), et de la tension de surface (γ) sont fondés sur des formules physico-chimiques bien connues que l'on peut trouver dans la plupart des publications sur les propriétés physico-chimiques des composés. Elles expriment d , n , et γ comme fonctions de MV, MR, ou P_r . Une fois que MV,

MR, ou P_r ont été prédits de manière additive, la prédiction de d , n , et γ se fait directement en utilisant ces formules.

La détermination des incréments atomiques additifs-constitutifs de MV, MR, et P_r a été effectuée de manière interne par des chercheurs ACD/Labs, en utilisant de vastes bases de données expérimentales liant la structure à la densité, l'indice de réfraction et la tension de surface. MV, MR, et P_r ont été

recalculés à partir de d , n , et γ . Ces paramètres constituent des informations dont ACD/Labs, Inc. est propriétaire.

La prédiction de la constante diélectrique ϵ (permittivité) ressemble beaucoup à la prédiction du point d'ébullition, qui est un produit ACD/Labs séparé disponible par ACD/ChemSketch. Des scientifiques établis d'ACD/Labs ont découvert une fonction additive, qui lie la constante diélectrique à d'autres propriétés macroscopiques telles que MV, qui peuvent être traitées de manière additive, comme MV. Cette relation découverte, les incréments atomiques additifs-constitutifs de cette fonction ont été obtenus en utilisant de vastes banques de données composées de structures moléculaires et de leur constante diélectrique observée. En utilisant la fonction et l'estimation de MV de la structure entrée, sa constante diélectrique peut être rapidement prédite.

Volume molaire, MV

Par définition,

$$MV = \frac{MW}{d}$$

ACD/ChemSketch calcule le volume molaire à partir d'incrément additifs. Les incréments atomiques additifs ont été obtenus en utilisant une base de données de densité et MW calculé.

Réfractivité molaire, MR

L'équation Lorentz-Lorenz relie l'indice de réfraction, la densité, et l'indice de réfraction:

$$MR = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{MW}{d}$$

ACD/ChemSketch calcule la réfractivité molaire à partir des incréments additifs. Les incréments atomiques additifs ont été obtenus en utilisant une base de données de densité, indice de réfraction, et MW calculé.

Parachore, P_r

Par définition,

$$P_r = \left(\frac{MW}{d} \right) \gamma^{1/4}$$

ChemSketch calcule le parachore à partir des incréments additifs. Les incréments atomiques additifs ont été obtenus en utilisant une base de données de densité, tension de surface, et MW calculé.

Densité, d

Par définition,

$$d = \frac{MW}{MV}$$

ACD/ChemSketch calcule la densité à partir du MW et du volume molaire calculé (voir ci-dessus).

Indice de Réfraction, n

Par l'équation de Lorentz-Lorenz,

$$n = \sqrt{\frac{2 \cdot MR + MV}{MV - MR}}$$

ACD/ChemSketch calcule l'indice de réfraction à partir du volume molaire et de la réfractivité molaire, ceux-ci étant calculés comme ci-dessus.

Tension de surface, γ

Par définition,

$$\gamma = \left(\frac{P_r}{MV} \right)^4$$

ACD/ChemSketch calcule la tension de surface à partir du MV calculé (voir ci-dessus) et du P_r calculé (voir ci-dessus).

Constante diélectrique, ϵ (Permittivité)

Par définition,

$$f(\epsilon) = f(MV, \text{Fonction Additive})$$

ACD/ChemSketch calcule la constante diélectrique à partir du MV calculé (voir ci-dessus) et d'une fonction additive empirique brevetée.

Polarisabilité

Cette propriété est calculée à partir de la Réfractivité molaire (MR) comme suit :

$$\text{Polarisabilité} = 0,3964308 \cdot MR$$

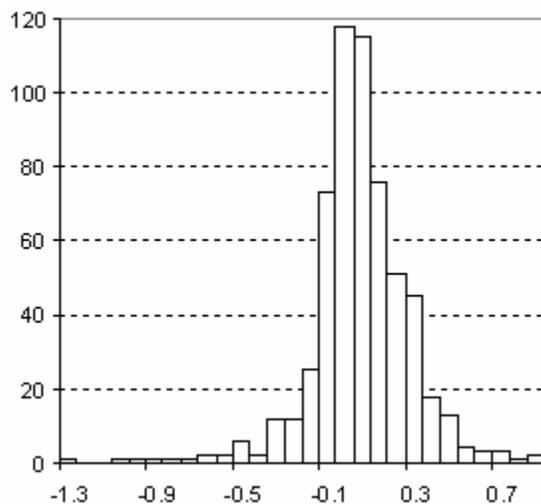
Masses mono isotopique, nominale et moyenne

La masse mono isotopique (M_{mi}) est la masse exacte de l'isotope stable le plus abondant qui peut être produit naturellement.

La masse nominale (M_n) est la somme des masses mono isotopiques approximatives des éléments formant la molécule.

La masse moyenne (M_{mv}) est la masse calculée d'une particule d'après le poids atomique des éléments qui la composent.

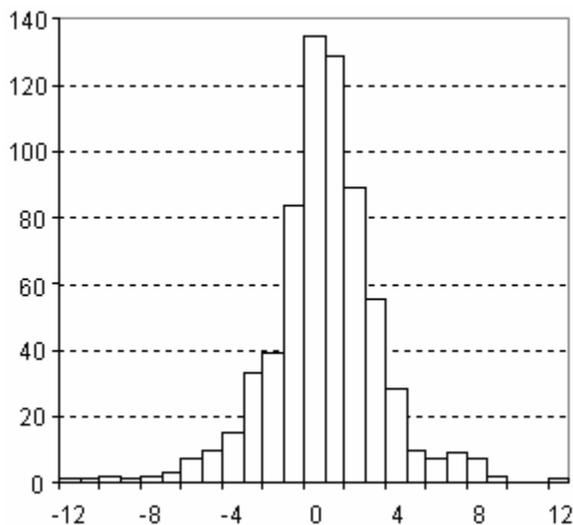
Statistiques de corrélation avec les données expérimentales**Distribution de l'erreur de prédiction de la réfractivité molaire**



Echelle Verticale: Nombre de structures testées
 Echelle Horizontale: Erreur d'estimation de réfractivité molaire ACD
 Nombre de structures testées: 592

$$MR_{exp} = 0,99901(\pm 0,00067) MR_{calc} + 0,026(\pm 0,025) \quad R=0,999867, \text{ StD}=0,23$$

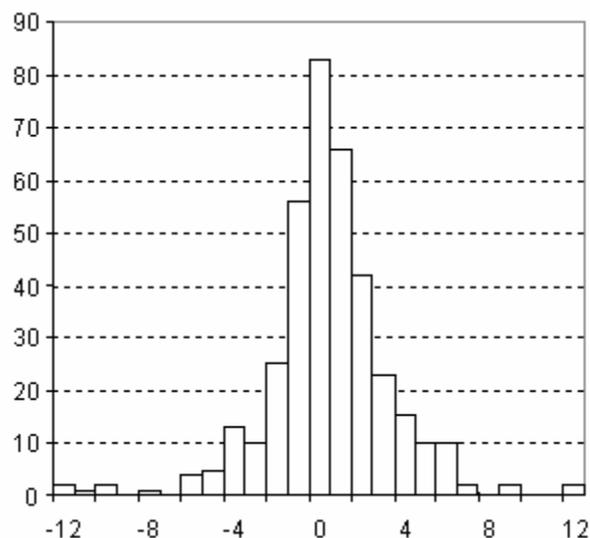
Distribution de l'erreur de prédiction du volume molaire



Echelle verticale: Nombre de structures testées
 Echelle horizontale: Erreur d'estimation Volume molaire ACD
 Nombre de structures testées: 671

$$MV_{exp} = 0,9989(\pm 0,0020) MV_{calc} + 0,18(\pm 0,29) \quad R=0,998626, \text{ StD}=2,74$$

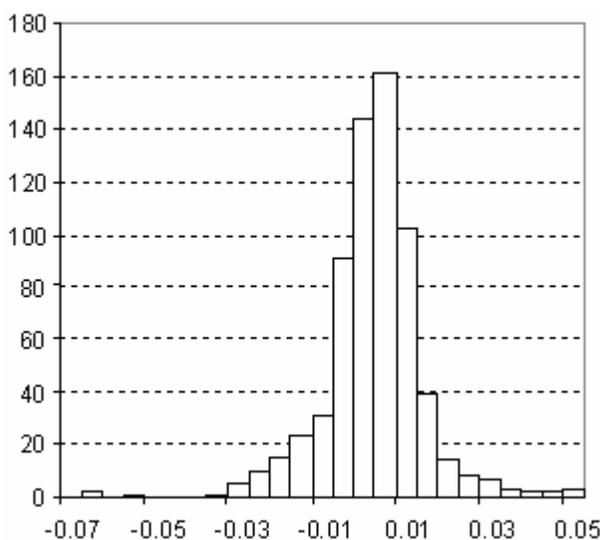
Distribution de l'erreur de prédiction du parachore



Echelle verticale: Nombre de structures testées
 Echelle horizontale: Erreur d'estimation Parachore ACD
 Nombre de structures testées: 377

$$Pr_{exp} = 0,9978(\pm 0,0015) Pr_{calc} + 0,68(\pm 0,46) \quad R=0,99958, \text{ StD}=3,11$$

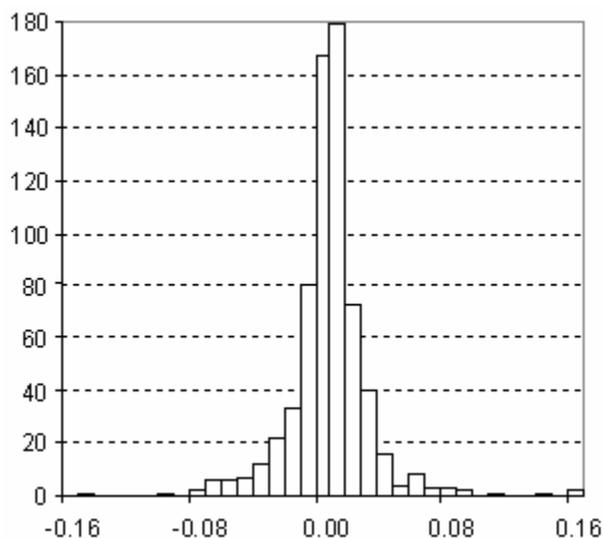
Distribution de l'erreur de prédiction de l'indice de réfraction



Echelle verticale: Nombre de structures testées
 Echelle horizontale: Erreur d'estimation Indice de réfraction ACD
 Nombre de structures testées: 665

$$n_{exp}^{20} = 0,98035(\pm 0,0073) n_{calc}^{20} + 0,028(\pm 0,011) \quad R=0,982, \text{ StD}=0,012$$

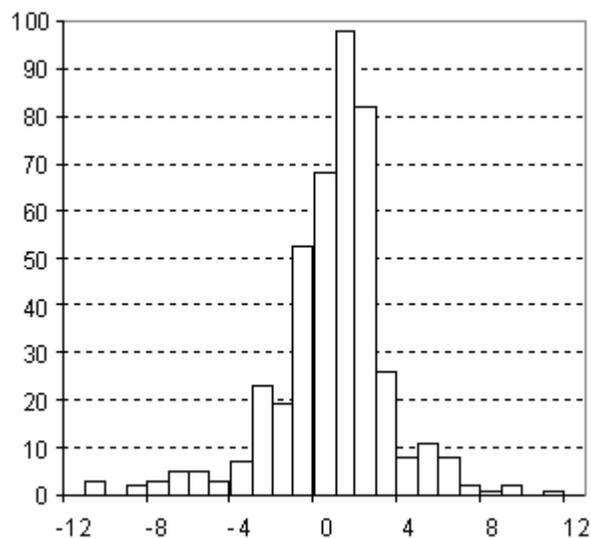
Distribution de l'erreur de prédiction de la densité



Echelle verticale: Nombre de structures testées
 Echelle horizontale: Erreur d'estimation Densité ACD
 Nombre de structures testées: 671

$$d^{20}_{exp} = 0,9947(\pm 0,0036) d^{20}_{calc} + 0,0052(\pm 0,0036) \quad R=0,995683, \text{ StD}=0,028$$

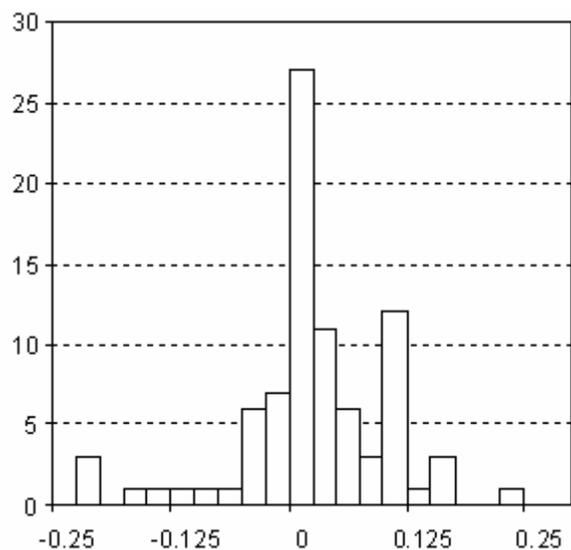
Distribution de l'erreur de prédiction de la tension de surface



Echelle verticale: Nombre de structures testées
 Echelle horizontale: Erreur d'estimation Tension de surface ACD
 Nombre de structures testées: 432

$$st^{20}_{exp} = 0,998(\pm 0,018) st^{20}_{calc} + 0,08(\pm 0,53) \quad R=0,934720, \text{ StD}=2,84$$

Distribution de l'erreur d'estimation de la constante diélectrique (Permittivité)



Echelle verticale:

Echelle horizontale:

Nombre de structures testées:

Nombre de structures testées

Erreur d'estimation pour la constante diélectrique (Permittivité)

85

Note: Dérivé seulement pour les hydrocarbures $\epsilon_{\text{exp}} = 1,005(0,033)$ $\epsilon_{\text{exp}} - 0,013(0,072)$

R=0,9588, StD=0,079

Annexe C. Bonus

Que sont les “Bonus”?

Les bonus sont des boutons supplémentaires qui étendent la fonctionnalité d'ACD/ChemSketch. Ils sont en fait proposés en tant que programmes ACD/ChemBasic associés aux 22 boutons supplémentaires ChemSketch. ACD/ChemBasic est un langage de programmation spécial qui permet de personnaliser le logiciel ACD/Labs, et nous pensons que c'est une excellente manière d'en montrer l'utilité, tout en étendant encore davantage les applications de votre ACD/ChemSketch !

Notez qu'il n'est pas nécessaire de connaître ACD/ChemBasic (bien que si vous le souhaitez vous puissiez apprendre en utilisant le code des Bonus comme exemple).

Où les obtenir?

Pour vérifier si vous possédez déjà des bonus, recherchez tous les fichiers .BAS dans votre dossier d'exemple ACD/Labs (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES). Si vous n'en trouvez aucun, vous pouvez télécharger des Bonus gratuitement depuis notre site Internet :

http://www.acdlabs.com/products/chem_dsn_lab/goodies.html

Ils sont d'installation et d'utilisation simples. Suivez simplement les instructions d'installation fournies sur la page Internet et profitez de ces nouvelles caractéristiques ACD/ChemSketch.

Après l'installation, les outils Bonus sont disponibles sous forme de boutons dans la barre d'outils que vous avez spécifiée. Vous pourrez plus tard personnaliser la barre d'outils (<voir la Section 2.2.1).

Remarque Les boutons Bonus ChemBasic sont seulement disponibles dans le mode Structure.

Bonus

La liste ci-dessous présente les boutons Bonus disponibles actuellement sur notre site Internet:

Bouton	Fonction	Utilisation
	Insère une page blanche à n'importe quel endroit dans votre document ChemSketch. Notez que la procédure habituelle (menu Pages / Nouveau) ajoute une page à la fin du document.	Pour insérer une page blanche avant une page donnée, allez sur cette page donnée et cliquez sur le bouton Insérer Page  .
	Clone la page en cours (ainsi que son contenu) le nombre de fois souhaité. Ceci est très utile pour compléter le document par des modèles de page, des tableaux, des titres, etc. Les nouvelles pages sont ajoutées à la fin du document.	Rendez la page que vous souhaitez cloner active, et cliquez sur Cloner Page  . Dans la boîte de dialogue qui apparaît, spécifiez le nombre de clones et cliquez sur OK .

Bouton	Fonction	Utilisation
	Déplace et copie les pages, c'est à dire change l'ordre des pages de votre document.	<p>1. Allez sur la page que vous souhaitez déplacer ou copier.</p> <p>2. Cliquez sur Déplacer/Copier une page .</p> <p>3. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez le numéro de la page après laquelle vous souhaitez placer la page en cours, puis définissez l'action souhaitée : Copier ou Déplacer. Cliquez sur OK.</p>
	Permet de couper/coller ou copier/coller une séquence de pages dans un nouvel ordre à l'intérieur du même document.	<p>1. Cliquez sur ce bouton et, dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez le numéro des pages à déplacer ou copier dans un nouvel ordre.</p> <p>2. Entrez le numéro de la page après laquelle vous souhaitez placer l'ensemble de pages sélectionné.</p> <p>3. Spécifiez l'opération souhaitée (Copier ou Déplacer) et cliquez sur OK.</p>
	Supprime un ensemble de pages en une fois. Notez que les pages supprimées ne peuvent pas être récupérées par la commande Rétablir du menu Edition .	<p>1. Cliquez sur le bouton Supprimer les pages .</p> <p>2. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez la séquence de pages à supprimer.</p> <p>3. Cliquez sur OK.</p>
	Change le nom des pages. Notez que le nom des pages sera affiché lorsque vous cliquerez sur Page 1/1 dans la barre d'Etat.	<p>1. Cliquez sur ce bouton.</p> <p>2. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez le numéro de la page à (re)nommer, le nouveau nom de page, puis cliquez sur OK.</p> <p>3. Si vous souhaitez renommer la page suivante, dans le message qui apparaît, cliquez sur Yes et répétez l'opération précédente. Si vous ne souhaitez pas renommer la page suivante, cliquez sur No.</p>
	Insère des numéros de page ou des annotations complexes dans votre document. Notez qu'une annotation sera insérée dans le coin inférieur droit de la page.	<p>1. Cliquez sur ce bouton.</p> <p>2. Entrez un modèle d'annotation de page dans la boîte de dialogue qui apparaît et cliquez sur OK.</p> <p>Clés pour les modèles d'annotation :</p> <p>\$P- insertion des numéros de page</p> <p>\$N- insertion de noms de pages (qui peuvent être insérés en cliquant sur Renommer les Pages  ou en utilisant Renommer (menu Pages))</p> <p>Vous pouvez également inclure un texte fixe dans votre modèle d'annotation.</p> <p>(Par exemple: le modèle Page \$P: \$N insérera « Page 1: <i>Nom de Page</i> », etc. annotations).</p> <p>Un modèle qui ne contient aucune clé insérera un texte fixe dans chaque page; par exemple, vous pouvez signer toutes les pages de votre nom.</p>
	Annote vos documents d'après le contenu de la partie texte située en haut à gauche de chaque page. Ceci est très pratique pour la gestion de gros documents et de présentations.	Cliquez sur ce bouton pour annoter toutes les pages comportant du texte. Après l'exécution du programme, cliquez sur le compteur de pages dans la barre d'Etat pour visualiser les noms de page.
	Parcourt les dossiers pour trouver les documents ChemSketch spécifiés, ainsi que pour rechercher une ligne de texte dans un document ChemSketch sans l'ouvrir.	Cliquez sur ce bouton et suivez les instructions qui apparaissent dans la boîte de dialogue.
	Exporte toutes les pages sélectionnées du document en cours dans un fichier HTML, que vous pouvez ensuite visualiser avec votre navigateur Web préféré. Notez que cette option nécessite au minimum la version 4.01 de ChemSketch.	Tous les détails sont disponibles dans le fichier FILLTMPHELP.DOC fourni dans le dossier des Bonus (\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES).

Bouton	Fonction	Utilisation
Convertir Croquis en VRML 	Exporte toutes les molécules de la page en cours vers un fichier VRML 2.0, que vous pouvez alors visualiser avec Cosmo, GLView, ou un autre type de navigateur VRML.	<ol style="list-style-type: none"> Dessinez les structures que vous souhaitez exporter sur une même page. Cliquez sur ce bouton. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez le nom et l'emplacement du fichier .WRL vers lequel les structures doivent être exportées. Notez que si vous avez seulement entré le nom de fichier, le programme placera le fichier WRL résultant dans le même dossier que SK2VRML.BAS. Indiquez la présentation de structure désirée en choisissant l'option correspondante et cliquez sur OK.
Convertir SDF en Croquis 	Importe les données (molécules, textes, etc.) à partir d'un fichier de format SD de MDL vers un document ChemSketch.	<ol style="list-style-type: none"> Cliquez sur ce bouton. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, entrez le nom et l'emplacement du fichier SD que vous souhaitez importer (si vous tapez le nom de fichier sans indiquer le chemin d'accès entier, le programme recherchera votre fichier SD dans le dossier contenant les programmes ChemBasic. Ainsi, si vous avez placé le fichier SD dont vous avez besoin dans le même répertoire que SDF2SK.BAS, spécifiez simplement le nom de fichier sans chemin d'accès). Indiquez le nombre de structures à insérer par page, ainsi qu'un champ fichier SD contenant des molécules. Cliquez sur OK.
Convertir Croquis en SDF 	Exporte toutes les structures de la page en cours ou du document entier vers un fichier SD.	<ol style="list-style-type: none"> Ouvrez la page contenant les structures que vous souhaitez exporter (si nécessaire). Cliquez sur ce bouton et, dans la boîte de dialogue qui apparaît, choisissez ce que vous voulez importer: la page en cours ou le document entier. Indiquez si formule, FW, et ID, doivent être exportés avec les structures. Indiquez le nom et le chemin d'accès d'un fichier SD et cliquez sur OK. Notez que si vous tapez seulement le nom du fichier, le programme placera le fichier SD résultant dans le même répertoire que le fichier EXPDF.BAS FILE.
Assistant Tableau 	Crée des tableaux et/ou aligne des objets selon vos indications du nombre de lignes et de colonnes.	Pour créer un tableau et y placer des objets dessinés : <ol style="list-style-type: none"> Cliquez sur ce bouton. Vous obtiendrez des informations au sujet du nombre d'objets sur la page et des suggestions pour les aligner. Spécifiez le nombre de lignes et de colonnes du tableau. Choisissez de créer ou non des bordures dans le tableau si vous le souhaitez (case Mark-up table) puis cliquez sur OK. Pour créer un tableau vide, lancez l'assistant tableau alors que la page vierge est active.
Remplacer Élément 	Remplace tous les atomes d'un type donné par des atomes d'un autre type dans une structure chimique. Ceci est très utile pour le dessin des structures perfluorées, par exemple. Notez que cette opération ne peut s'effectuer que s'il n'y a qu'une seule structure sur la page.	<ol style="list-style-type: none"> Dessinez ou ne laissez qu'une structure sur la page et cliquez sur ce bouton. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, spécifiez l'élément que vous souhaitez remplacer et l'élément qui doit remplacer celui que vous avez indiqué précédemment, puis cliquez sur OK. Notez que les atomes d'hydrogène doivent être dessinés explicitement (utilisez la commande Hydrogènes Explicites dans le menu Outils).
Calculateur de Solution 	Calcule le poids du composé nécessaire à la préparation d'une solution aqueuse de volume et concentration molaire définis par l'utilisateur. Notez que cette opération ne peut s'effectuer que si une seule structure est présente sur la page.	<ol style="list-style-type: none"> Dessinez ou ne laissez qu'une structure sur la page et cliquez sur ce bouton. Dans la boîte de dialogue qui apparaît, spécifiez la concentration molaire et le volume de solution aqueuse souhaités puis cliquez sur OK.
Imprimante	Permet de créer rapidement des	Dessinez les structures pour lesquelles vous souhaitez

Bouton	Fonction	Utilisation
d'étiquettes 	étiquettes de produits chimiques et de les imprimer en Standard Avery (45 modèles inclus) ou selon votre propre modèle.	créer des étiquettes et cliquez sur Imprimante d'étiquettes . Vous pouvez créer des étiquettes de structures provenant d'un fichier SD si vous lancez ce programme avec une page vide active. Pour plus d'informations, voir LPRINTER.TXT fourni dans le dossier Bonus (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES).
Constructeur de Peptide 	Construit une structure peptide 3D à partir de la séquence des acides aminés.	Voir le fichier PEPBUILD.SK2 fourni dans le dossier Bonus (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES) pour obtenir de l'aide sur l'utilisation de cet outil.
Constructeur de Glucide 	Construit une structure à partir des noms abrégés de glucides.	Voir le fichier SUGARSK.TXT fourni dans le dossier Bonus pour de l'aide sur l'utilisation de cet outil (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES).
Supprimer Ions Spectateurs (Déminéraliser) 	Un fichier SD contenant une ou plusieurs entrées de structures minérales peut être transformé en fichier SD contenant une molécule par entrée. Ce bouton supprime l'ion le plus petit par le MW ou par son nombre d'atomes. Par exemple, l'acétate de sodium verra son atome de sodium supprimé, et l'acide acétique sera conservé. (Remarque : la molécule conservée est placée sous une forme neutre)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Spécifiez le nom et le chemin d'accès d'un fichier SD. Notez que si vous entrez le nom de fichier seul, le programme recherchera un fichier dans le dossier Bonus (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES). 2. Définissez un critère de la partie la plus petite : masse ou atome. 3. Le fichier SD résultant sera enregistré dans le même répertoire que celui que vous avez indiqué sous le nom NOUVEAUFICHER.SDF. Un fichier échantillon spécial, SALTS.SDF avec 5 minéraux est placé dans le dossier Bonus (\\EXAMPLES\CHEMBAS\GOODIES) pour des tests.
Constructeur d'acide nucléique 	Construit une structure (une ou deux chaînes) d'acide nucléique (ADN, ARN) en 3D à partir de la séquence saisie.	Cliquez sur ce bouton et suivez les instructions de la boîte de dialogue qui apparaît.
Sélecteur de colonne 	Cet outil permet que le chromatographe recherche dans une base de données des colonnes les plus utilisées, afin de localiser celles dont les propriétés sont les plus appropriées pour la séparation.	Cliquez sur ce bouton et, dans la boîte de dialogue qui apparaît, spécifiez si vous souhaitez comparer la colonne sélectionnée avec la liste, ou deux colonnes sélectionnées entre elles. Cliquez sur OK . Dans la boîte de dialogue suivante, choisissez la ou les colonnes appropriées dans la liste déroulante, et définissez les coefficients de poids à appliquer aux paramètres des six colonnes, puis cliquez sur OK . (Pour obtenir des informations sur l'utilisation de cet outil, voir le fichier COLSEL_W.PDF disponible dans le dossier (\\DOCS)).