

Des logiciels libres pour enseigner la chimie

Georges Khaznadar <georgesk@ofset.org>

association OFSET

Mai 2011




Table des matières

- 1 Programmes sans interface graphique
 - OpenBabel
 - Chemeq
- 2 Ressources utilisant le réseau Internet, services
 - chemical-structures
 - L'applette de Jmol
 - WIMS
- 3 Programmes graphiques : modèles moléculaires
 - Rasmol
 - pyMol
 - Ghemical
 - Avogadro
- 4 Programmes graphiques : divers
 - gCrystal
 - Kalzium
 - pyAcidobasic
- 5 Crédits



Remerciements



Je tiens à remercier le Comité d'organisation MIEC-JIREC 2011, qui a facilité ma participation à ce colloque.



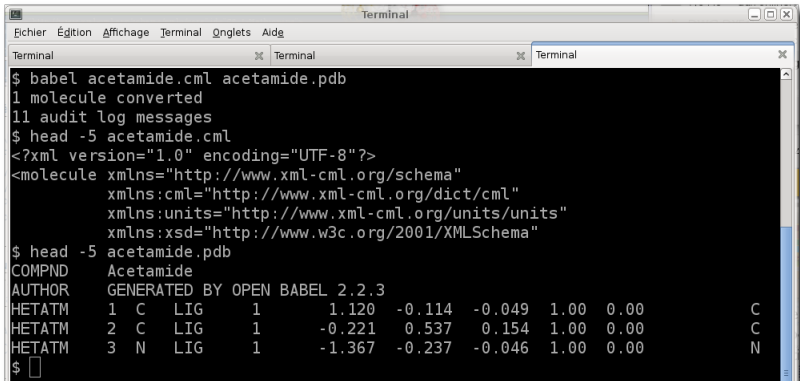
À propos de l'auteur

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



OpenBabel

OpenBabel fournit une bibliothèque intégrable dans divers programmes, et une commande en ligne nommée « `babel` » qui permet de nombreuses interconversions entre les divers langages de description de molécules.



```
$ babel acetamide.cml acetamide.pdb
1 molecule converted
ll audit log messages
$ head -5 acetamide.cml
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<molecule xmlns="http://www.xml-cml.org/schema"
  xmlns:cml="http://www.xml-cml.org/dict/cml"
  xmlns:units="http://www.xml-cml.org/units/units"
  xmlns:xsd="http://www.w3c.org/2001/XMLSchema"
$ head -5 acetamide.pdb
COMPND      Acetamide
AUTHOR      GENERATED BY OPEN BABEL 2.2.3
HETATM      1  C   LIG   1      1.120  -0.114  -0.049  1.00  0.00      C
HETATM      2  C   LIG   1     -0.221   0.537   0.154  1.00  0.00      C
HETATM      3  N   LIG   1     -1.367  -0.237  -0.046  1.00  0.00      N
$
```



Chemeq

Chemeq permet à l'ordinateur d'analyser des notations de molécules ou de réactions chimiques, et de leur donner du sens. On peut l'utiliser pour vérifier si deux écritures sont équivalentes, ou mettre en forme typographiquement des textes de réactions chimiques. Ce programme permet aussi de combiner entre elles des demi-réactions issues de collections de couples acide-base, ou rédox. Les données numériques telles que les potentiels normaux ou les constantes d'équilibre sont traités correctement lors de ces combinaisons. Chemeq a été inclus dans les ressources standard du service WIMS.



Chemeq : exemples

```

Fichier  Édition  Affichage  Terminal  Onglets  Aide
Terminal  Terminal  Terminal  Terminal
$ r1="Fe^3+ + e^- -> Fe^2+ (0.77 V)"
$ r2="Fe^2+ + 6CN^- -> Fe(CN)6^4- (Kfa=1e24)"
$ r3="Fe^3+ + 6CN^- -> Fe(CN)6^3- (Kfb=1e31)"
$ echo "$r1 # $r2 ~ $r3" | chemeq -l
Fe(CN)_{6}^{3-}\,+\,e^{-}\,\rightarrow\,Fe(CN)_{6}^{4-}\,(0.355899 V)
$ echo $r1 | chemeq -l
Fe^{3+}\,+\,e^{-}\,\rightarrow\,Fe^{2+}\,(0.77 V)
$ echo $r2 | chemeq -l
Fe^{2+}\,+\,6\,CN^{-}\,\rightarrow\,Fe(CN)_{6}^{4-}\,(Kf\,=\,1\times 10^{+24})
$ echo $r3 | chemeq -l
Fe^{3+}\,+\,6\,CN^{-}\,\rightarrow\,Fe(CN)_{6}^{3-}\,(Kf\,=\,1\times 10^{+31})
$ 

```



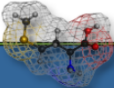
Chemeq : exemples, après passage dans L^AT_EX

- 1 $Fe^{3+} + e^{-} \rightarrow Fe^{2+} (0.77V)$
- 2 $Fe^{2+} + 6 CN^{-} \rightarrow Fe(CN)_6^{4-} (Kf = 1 \times 10^{+24})$
- 3 $Fe^{3+} + 6 CN^{-} \rightarrow Fe(CN)_6^{3-} (Kf = 1 \times 10^{+31})$
- 4 $Fe(CN)_6^{3-} + e^{-} \rightarrow Fe(CN)_6^{4-} (0.355899V)$



chemical-structures

Chemical Structures



```
<molecule xmlns="http://www.xml-cml.org/schema/cml2/core" id="CS_L-Methionine">  
<formula concise=" C 5 H 11 N 1 O 2 S 1 "/>  
<identifier version=" InChI/1 ">  
<basic>1/CSH11NO2S/c1-9-2-4(6)5(7,8)/4H,2-3,6H2,1H3,(H,7,8)/4-/m0/s1</basic>
```

[Index des noms](#) | [Index des formules](#)

Répertoires

- [Anhydrides d'acide](#)
- [Alcools](#)

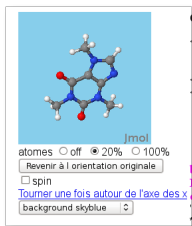
chemical-structures est une collection de structures de molécules organiques organisée par Jérôme Pansanel sous forme d'arborescence de fichiers HTML. On peut servir ces structures à travers un service web, [comme ici](#), à partir du serveur pédagogique du lycée Jean Bart de Dunkerque.

Le service web permet de télécharger les structures à divers formats utilisés en chimie informatique, grâce au paquet OpenBabel, et on peut aussi en avoir un aperçu à l'aide de l'applette libre de Jmol.



L'applette de Jmol

Cette applette permet d'afficher des molécules en trois dimensions, de façon interactive, très simplement. Le nombreux paramètres de cette applette permettent des animations très sophistiquées. Voici un [lien](#) vers la page de démonstration de cette applette de Jmol.



WIMS : quelques modules pour la chimie

- 1 [Reconnaître des molécules](#)
- 2 [Nomenclature en chimie organique](#)
- 3 [Lewis, VSEPR](#)
- 4 [Acides et bases](#)
- 5 [Réactions d'oxydoréduction](#)
- 6 [Pile électrochimiques](#)
- 7 [Équilibrer un bilan de réaction chimique](#)
- 8 [Coefficient de réaction, loi de Gulder-Vaage](#)
- 9 [Méthode du tableau d'avancement de réaction](#)
- 10 [etc. \(moteur de recherche de WIMS\).](#)



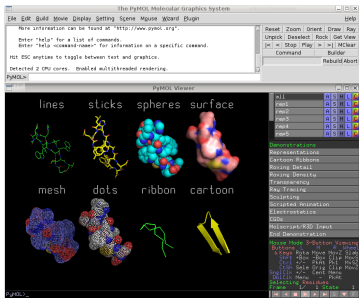
Rasmol

Rasmol est un logiciel de visualisation de structures moléculaires, qui possède aussi une interface en ligne de commande avec un langage spécifique. Permet de représenter les molécules de diverses façons, et de réaliser des animations. Voir le site web de [Rasmol](http://www.rasmol.org). Ce logiciel a peu évolué depuis 2002.



pyMol

Un logiciel interactif, qui possède aussi une interface en ligne de commande avec un langage spécifique. Permet de représenter les molécules de diverses façons, et de réaliser des animations. Voir le site web de [pyMol](http://www.pymol.org) La bibliothèque Python de pyMol est puissante et réutilisable.



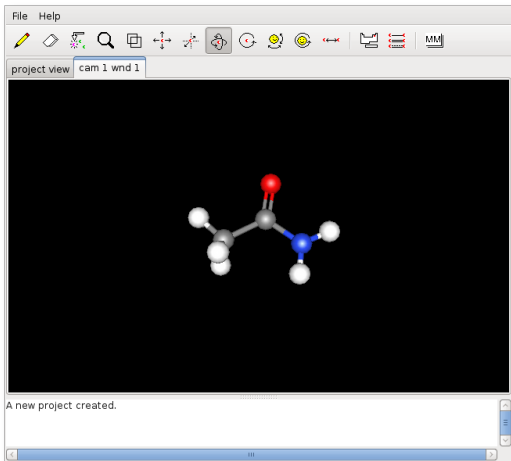
Ghemical

Possède beaucoup des atouts de RasMol et pyMol, et en plus permet d'éditer soi-même des structures moléculaires d'une façon intuitive. Divers calculateurs permettent d'optimiser la géométrie d'une molécule, en utilisant des champs de forces standards. Une caractéristique très impressionnante est la possibilité de visualiser quelques femtosecondes de dynamique moléculaire : les étudiants comprennent aussitôt la différence avec les modèles statiques en matière plastique.



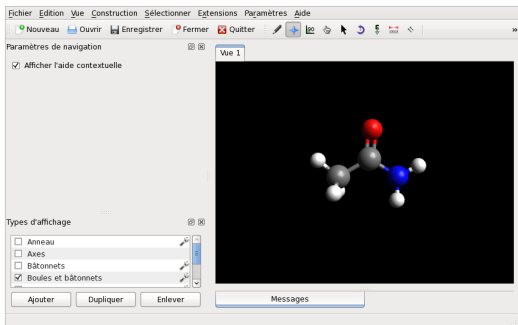
Chemical

Voir le site web de [Gchemical](#).



Avogadro

Avogadro offre à peu près les mêmes services que Ghemical, avec une interface peut-être plus accessible aux débutants, pour les premières manipulations. Il est multi-plateforme. Voir le [site web](#) d'Avogadro.



gCrystal

gCrystal permet de construire de façon interactive des structures cristallines et de les visualiser. Voir le [site web](#) de gCrystal.

The screenshot displays the gCrystal software interface. On the left, a periodic table titled 'Tableau périodique des éléments' is visible. Below it, there are fields for 'Change' (set to 0) and 'Atome' (set to Na), with a table of coordinates (x, y, z) for Na and Cl. A 'Rayon' section shows 'Type' as 'Inconnu' and 'Personnalisé' as 'valeur (pm): 20'. At the bottom, a terminal window shows the command 'atk-bridge-WARNING **: AT_SPI_REGIS' and 'startup'. On the right, a window titled 'Gnome Crystal' shows a 3D ball-and-stick model of a crystal structure. Below that, a 'Maille' window shows the lattice type as 'Cubique à faces centrées', the space group as 'Automatique 196', and lattice parameters: a (pm) = 100, b (pm) = 100, c (pm) = 100, with angles alpha, beta, and gamma all set to 90 degrees.



Kalzium

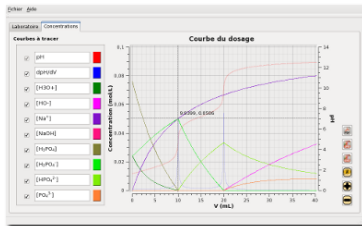
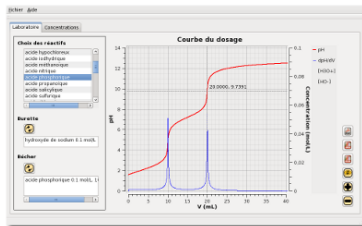
Kalzium est un beau programme graphique qui exploite une base de données intéressante indexée par les éléments chimiques. L'entrée principale de l'interaction passe par un tableau périodique de Mendéléiev. Voir le [site web](#) de Kalzium.

The screenshot displays the Kalzium software interface. The main window shows a periodic table with elements color-coded by groups. The element Vanadium (V) is highlighted with a red circle. A pop-up window titled 'Vanadium (23) - Kalzium' is open, showing a detailed view of the element. The pop-up window includes a search bar, a 'Vue d'ensemble' (Overview) section with the element symbol 'V', atomic number '23', and atomic weight '50.9415 u'. Below this, there is a 'Modèle de l'atome' (Atomic Model) section and a 'Divers' (Miscellaneous) section with a scrollable list of facts: 'Cet élément a été découvert en 1830', 'Cet élément a été découvert par N. Sefström.', 'Origine du nom : « Vanadis » est un autre nom pour la déesse nordique Freyja'. The interface also features a menu bar with options like 'Fichier', 'Affichage', 'Outils', 'Configuration', and 'Aide', and a legend for the periodic table groups.





pyAcidobasic

pyAcidobasic permet de simuler des dosages acido-basiques. L'utilisateur tire-glisce des acides présents dans une liste de produits, pour définir le contenu de la burette (un seul produit) et celui du bécher (mélanges possibles). Dès qu'un dosage est possible, l'ordinateur établit les courbes de dosage (pH, concentrations des diverses espèces). L'auteur a écrit pyAcidobasic et maintient le paquet Debian/Ubuntu.



Crédits

Toutes les illustrations sont © 2011 Georges Khaznadar, licence :
[Creative Commons Attribution ShareAlike](#) 

Ce diaporama est disponible sous licence : [GFDL](#)  , à l'adresse
<http://speeches.ofset.org/georges> (choisir l'item **2011-orsay**).

