
Jmol

Posté par benoit.markey - 02-01-2011 à 17:47

Bonjour,
Tout d'abord meilleurs voeux à tous!!!

je reviens sur un atelier présenté lors du colloque de Bordeaux 2010 par Yves Noël et concernant l'utilisation de Jmol:
(pour mémoire).

En fait je ne sais pas trop comment commencer: je voudrais faire un exo où il faut retrouver des groupes caractéristiques dans une molécule. Il me faudrait déjà les fichiers en .pdb ou .mol pour les molécules: ça en cherchant je trouverais!!! Mais ensuite je suis un peu perdu. Si quelqu'un connaît la suite ou peut me mettre en contact avec Yves Noël.....

A bientôt

Benoît

=====

Re:Jmol

Posté par georgesk - 02-01-2011 à 18:08

Bonjour Benoit, bonne année !

À propos de molécules : il y a le paquet debian "chemical-structures" : <http://packages.debian.org/fr/sid/chemical-structures> qui doit s'installer sous Ubuntu aussi.

Je l'ai installé entre autres sur le serveur de notre lycée : https://pedago.lyceejeanbart.fr/chemical-structures/formula_index_fr.html

Comme c'est du standard et que ça vient avec quelques 500 molécules prédéfinies, je pense que le mieux est de prototyper un module qui va chercher les molécules en calculant l'URL de la molécule automatiquement.

hmmm... serait-ce raisonnable d'ajouter le paquet chemical-structures aux dépendances d'un service wims standard ? Dans un tel cas, on pourrait réaliser un script slib offrant les molécules au format .CML (directement miscible en toutes proportions avec Jmol :))

=====

Re:Jmol

Posté par benoit.markey - 06-01-2011 à 14:26

Effectivement la base est impressionnante!!!

Mais j'ai une question: chaque atome étant numéroté, comment fait-on pour trouver cette affectation de manière simple sans devoir ouvrir le fichier. mol ou .cml???

=====

Re:Jmol

Posté par Yves NOEL - 07-01-2011 à 11:11

Une fois que vous avez un fichier décrivant la molécule, je peux vous aider.

Si je comprends bien ce que tu veux faire c'est un exo du type:

"Sur la molécule suivante sélectionnez les atomes formant le groupement méthyle "
(ou carbonyle ou je ne sais quoi d'autre.)

C'est faisable puisque dans le type de réponse jmolclick on est pas obligé de donner la réponse sous la forme d'un numéro d'atome mais plus généralement sous la forme d'une sélection d'atomes (appelé atom expression dans la doc jmol).

La sélection d'atomes la plus simple est basée sur le numéro des atomes et est du type :
atomno=5

Mais je pense que c'est inutilisable ici.

Il y a des sélections d'atomes basées sur la connectivité et/ou sur la nature des atomes.

Exemple:

connected(3,hydrogen)

signifie "tous les atomes connectés exactement à 3 atomes d'hydrogène (ils peuvent être connectés en plus à d'autres types d'atomes)"

Si on combine ça (avec un ET logique) avec le fait que ça soit un carbone on obtient une expression correspondant à tous les carbones des groupements méthyle:

(carbon) and connected(3,hydrogen)

Si on veut aussi les atomes d'hydrogène, ça se complique:

((carbon) AND connected(3,hydrogen)) OR ((hydrogen) AND connected((carbon) AND connected(3,hydrogen)))

qui peut se lire : "le carbone du méthyle ou bien les hydrogènes qui sont connectés à un carbone méthyle"

Un aperçu de ces atom expressions est donné sur un des posters que j'avais présentés à Bordeaux.

<http://australe.upmc.fr/access/content/user/noely/WIMS/jmol.pdf>

Il y a aussi celui sur le type de réponse jmolclick:

<http://australe.upmc.fr/access/content/user/noely/WIMS/jmolclick.pdf>

Dites moi ce que vous en pensez.

Yves

=====

Re:Jmol

Posté par benoit.markey - 10-01-2011 à 09:13

Bonjour Yves,

Merci pour toutes ces infos: il est vrai que tes posters fourmillent de plein de renseignements. Je fais mes essais et je te tiens au courant

Benoît

=====