

## Des logiciels libres pour enseigner la chimie

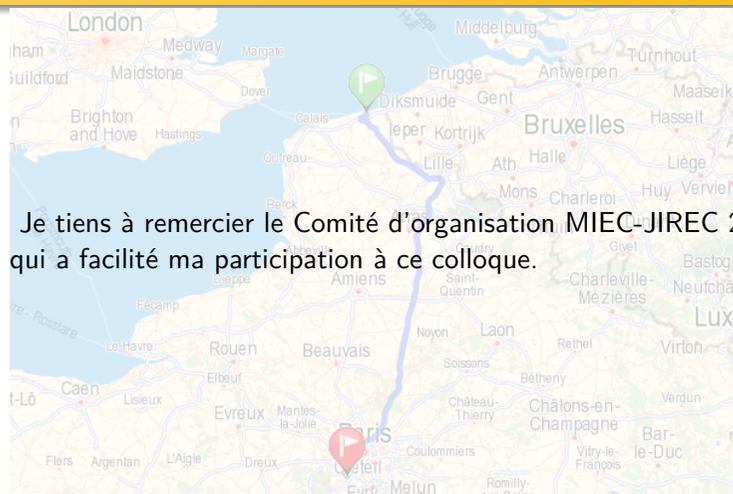
Georges Khaznadar <[georgesk@ofset.org](mailto:georgesk@ofset.org)>

association OFSET

Mai 2011



## Remerciements



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



## 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
  - Chemical
  - Avogadro
- 4 Programmes graphiques : divers
  - gCrystal
  - Kalzium
  - pyAcidobasic
- 5 Crédits



## À propos de l'auteur



Georges Khaznadar est membre d'OFSET <[www.ofset.org](http://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](http://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.

```
Terminal
$ 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

```
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+} + 6CN^{-} \rightarrow Fe(CN)_{6}^{4-} (Kf = 1 \times 10^{24})
$ echo $r3 | chemeq -l
Fe^{3+} + 6CN^{-} \rightarrow Fe(CN)_{6}^{3-} (Kf = 1 \times 10^{31})
$
```

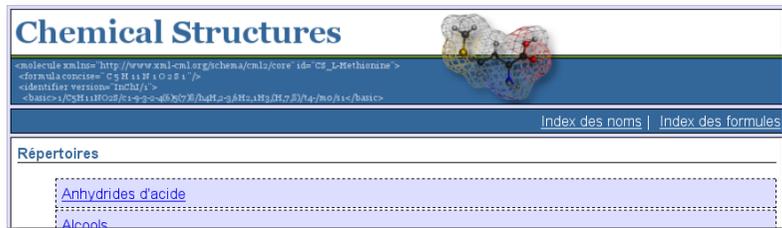


## Chemeq : exemples, après passage dans L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X

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



## chemical-structures



chemical-structures 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.

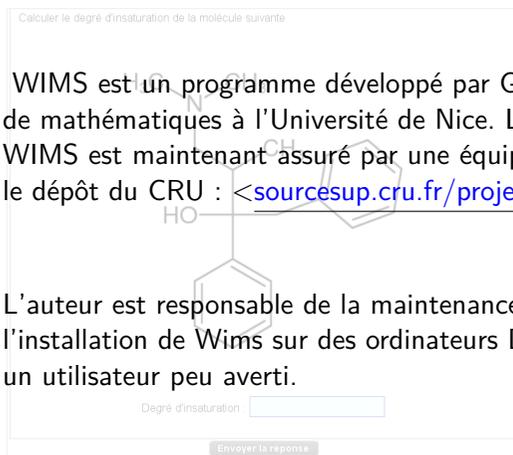


## L'applette de Jmol

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



WIMS est un programme développé par GANG Xiao, professeur de mathématiques à l'Université de Nice. Le développement de WIMS est maintenant assuré par une équipe, les sources sont dans le dépôt du CRU : <[sourcesup.cru.fr/projects/wimsdev](http://sourcesup.cru.fr/projects/wimsdev)>.

L'auteur est responsable de la maintenance d'un paquet facilitant l'installation de Wims sur des ordinateurs Debian ou Ubuntu par un utilisateur peu averti.



## 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.



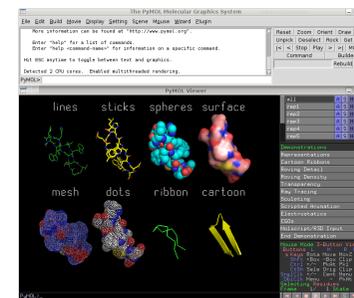
## Chemical

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.



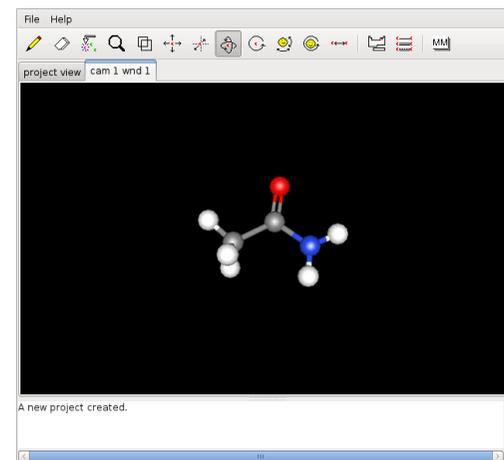
## pyMol

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.



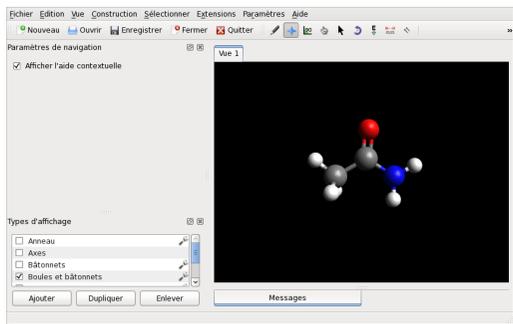
## Chemical

Voir le site web de [Chemical](http://www.chemical.org).



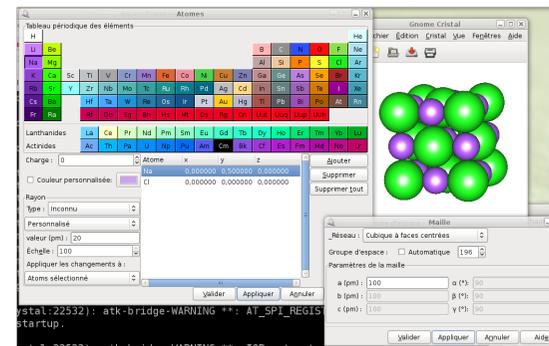
## Avogadro

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.



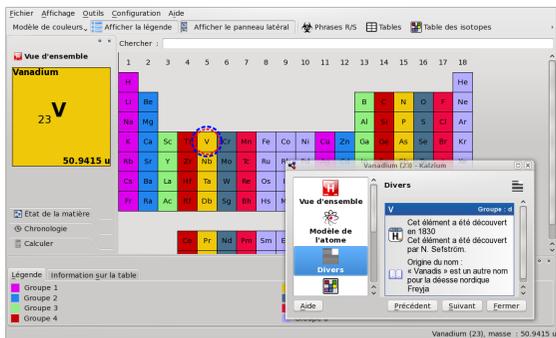
## gCrystal

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



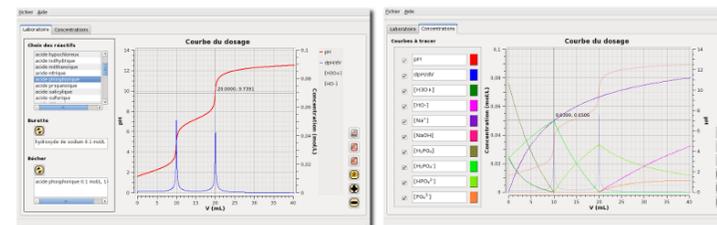
## Kalzium

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 Mendéléïev. Voir le [site web](#) de Kalzium.



## pyAcidobasic

pyAcidobasic permet de simuler des dosages acido-basiques. L'utilisateur tire-glisser 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**).

