

Une solution multiplate-forme pour construire et visualiser des molécules en 3D

En parcourant le numéro 9 de TIC'Edu de janvier février 2008, à la rubrique Construire et visualiser des molécules en trois dimensions, un lien propose d'aller sur le site Educnet :

<http://www2.educnet.education.fr/sections/phy/pratiques/materiel/molecules3d>

Les outils proposés sont les suivants :

- ChemsSketch pour construire les molécules :
<http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>
- Le plugin Chime pour les visualiser dans un navigateur :
<http://www.mdl.com/support/developer/chime/>

De nombreux documents utilisent ces deux outils, mais il faut absolument travailler dans un environnement windows.

Pourtant, en cliquant sur le lien ci-dessous, on arrive sur l'Espace collaboratif en biotechnologies :

<http://www.geniebio.ac-aix-marseille.fr/biospip/spip.php?article238>

Un tutoriel se lance pour apprendre à dessiner la molécule d'alanine avec ChemsSketch.

En dessous de cette animation un lien nous propose de dessiner des molécules en ligne avec MarvinSketch.

Sur le site de ChemAxon, on découvre que MarvinSketch est multiplate-forme, et qu'il suffit que Java soit installé pour qu'il fonctionne.

<http://www.chemaxon.com/marvin/download-user.html>

A l'usage, on s'aperçoit qu'il fonctionne de façon analogue à ChemsSketch.

Reste à visualiser les molécules construites. Là aussi on peut opter pour la solution libre Jmol :

<http://jmol.sourceforge.net/>

On découvre une solution multiplate-forme, qui permet de visualiser les molécules en 3D, mais aussi de les inclure dans une page HTML.

L'applet pour navigateur web Jmol fonctionne avec la plupart des Machines Virtuelles Java, y compris les implémentations de Microsoft et de Netscape 4.7* de la JVM 1.1.

Si vous utilisez Microsoft Internet Explorer sur un système d'exploitation Windows, Il est recommandé de mettre à jour avec la Machine Virtuelle Java de Sun en allant sur www.java.com.

L'application indépendante Jmol nécessite Java 1.4 ou supérieur. La dernière [Java 2 Platform Standard Edition](#) est recommandée.