

## **Promouvoir les Logiciels Utiles Maîtrisés et Economiques dans l'Enseignement Supérieur et la Recherche** <https://www.projet-plume.org/fiche/>

**Jmol** est un outil de visualisation de molécules gratuit, open source pour les étudiants, les éducateurs et les chercheurs en chimie et en biochimie.

<http://jmol.sourceforge.net/index.fr.html>

### **RasMol and OpenRasMol**

Molecular Graphics Visualisation Tool

<http://rasmol.org/>

### **RasTop Version 2.03**

Un logiciel de visualisation des molécules en 3D

Dans la lignée de Rasmol

<http://acces.ens-lyon.fr/biotech/rastop/accueil.htm>

### **Cn3d (See in 3D)**

Cette application apporte une meilleure qualité de visualisation que Rasmol et affiche en plus la structure primaire.

L'interface garde une apparence simple tout en laissant présager des possibilités étendues. L'application, qui bénéficie de mises à jour régulières,

utilise un format PDB modifié : c'est d'abord une interface de consultation très performante pour la banque de données moléculaires du NCBI.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml>

### **2.6 Chimera**

Activement développée à l'université de Californie, cette application.

Originaire du monde Unix, elle est aujourd'hui disponible sous toutes les plateformes dans leurs versions les plus récentes.

2014. Chimera [www.cgl.ucsf.edu/chimera/](http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/)

### **2.8 DeepView (SwissPDB Viewer)**

Puissant et complexe. Permet de charger simultanément plusieurs molécules, de comparer les structures spatiales,

mais aussi d'aligner les structures primaires. A réserver au spécialiste ou au prof très motivé !

Guex N.. 2012. Deep View (Swiss-Pdb Viewer) [www.expasy.org/spdbv/](http://www.expasy.org/spdbv/)

<http://spdbv.vital-it.ch/>

### **Jmol**

Jmol est un programme Java disponible à la fois comme application indépendante ou comme applet pour navigateur.

Une troisième version est apparue récemment sous forme d'un applet Javascript.

Ce programme reprend le langage de commande de Rasmol. La vitesse d'affichage est très rapide (surtout pour un programme en Java).

Comme pour Rasmol dont il s'inspire, il existe deux méthodes de travail pour afficher les molécules, l'une intuitive mais limitée faisant appel aux menus,

l'autre en ligne de commande (la fenêtre de la console est nommée Rasmol scripts).

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

**VMD** sont les initiales de Visual Molecular Dynamics (dynamique moléculaire visuelle) et le nom d'un programme permettant d'étudier en 3 dimensions la structure d'une molécule complexe. S'il est téléchargeable gratuitement, les conditions d'utilisation ne permettent

toutefois pas sa distribution sur dvd, comme c'est le cas pour le dvd Xplora Knoppix.  
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

### **V\_Sim**

V\_Sim offre la possibilité de représenter à l'écran des structures atomiques comme des arrangements cristallins, des joints de grain ou plein d'autres choses encore.

De nombreux formats de fichiers sont disponibles, binaires ou texte, c.f. la page des formats [anglais] ou autre format). La visualisation est en 3D où les atomes sont

figurés par des sphères colorées. L'interface propose de nombreuses fonctions permettant de choisir l'angle de vue, charger des densités, dessiner des plans, ...

Une bonne part de ces fonctionnalités sont décrites dans le manuel de l'utilisateur [anglais]. Enfin, V\_Sim propose d'exporter le rendu sous forme de fichiers images aux formats PNG, SVG ou d'autres encore.

[http://www-drfmc.cea.fr/L\\_Sim/V\\_Sim/index.fr.html](http://www-drfmc.cea.fr/L_Sim/V_Sim/index.fr.html)

### **Avogadro 1.0.3**

Avogadro est un éditeur de structures chimiques permettant de dessiner une composition moléculaire tridimensionnelle, avec plusieurs angles et perspectives.

Grâce à la bibliothèque Open Babel, il accepte près de 80 formats de fichiers, et peut exporter au format image, que ce soit en JPG, PNG ou POV-Ray.

Après installation du logiciel sur un poste de travail, des modèles de molécules sont accessibles à l'adresse suivante : C:\Program Files\Avogadro\share\avogadro\fragments.

<http://sourceforge.net/projects/avogadro/files/avogadro/1.1.1/Avogadro-1.1.1-win32.exe/download>

### **Avogadro 2.0.3**

Avogadro est un constructeur et un rédacteur faciles à utiliser de molécule. Il offre le rendu flexible et une architecture plugin puissante pour des réalisateurs.

Le programme soutient le bâtiment interactif des molécules avec la mécanique moléculaire intégrée et une base de données de fragment. La génération d'entrée pour

GAMESS ou calculs gaussiens est fournie. Pour la visualisation, le programme soutient les cellules, les isosurfaces et les orbitales cristallographiques d'unité des cubes gaussiens et de l'OpenDX.

<http://sourceforge.net/p/avogadro/news/2013/12/avogadro-2-072-released/>

### **Orbimol 3.1 ( java)**

Bases de données d'orbitales moléculaires  
vibrations et topologie de petites molécules

Auteurs : Patrick Chaquin et Franck Fuster

<http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml>

### **Gabedit**

Gabedit est une interface graphique pour les logiciels de chimie quantique, qui en sont en général dépourvus. Ces programmes sont, par exemple, Gamess-US, Gaussian,

Molcas, Molpro, MPQC, OpenMopac, PCGamess, ORCA et Q-Chem.

Gabedit peut permettre de visualiser une grande variété de résultats issus de calculs quantiques et apporte une aide précieuse quand à la manipulation des différents formats de fichiers utilisés en chimie quantique.

Son constructeur de molécules (Molecule Builder) permet de rapidement dessiner une molécule et de l'examiner en 3D. Gabedit permet aussi d'effectuer une recherche de

conformations en utilisant un potentiel de type mécanique moléculaire ou semi-empirique. Il fournit également la possibilité d'exporter l'ensemble de ces données dans une large gamme de formats.

Gabedit peut créer des fichiers d'entrée pour Gamess-US, Gaussian, Molcas, Molpro, MPQC, OpenMopac,

PCGmess, ORCA et Q-Chem. Après création du fichier d'entrée, Gabedit peut lancer le calcul, en utilisant l'un des 9 logiciels cités ci-dessus, sur la machine locale (Windows, Linux, ou Unix) mais aussi sur une machine serveur

(Cluster, centre de calcul, ...)

Gabedit peut également interpréter graphiquement un large panel de résultats issus de calcul quantique tels que : les orbitales moléculaires, les surfaces de densité électronique, de potentiel électrostatique, de la fonction de localisation électronique (ELF), et d'autres propriétés. Les surfaces peuvent faire l'objet de différents rendus (solide, transparent, grille).

Gabedit permet de visualiser (avec animation) les modes vibrationnels calculés par les 9 logiciels cités ci-dessus. Il peut aussi aider à visualiser des spectres calculés en IR, UV-Vis et Raman. Il permet de simuler le spectre RMN ainsi que la distribution isotopique d'une molécule donnée. L'ensemble de ces résultats pouvant, bien entendu, être exportés dans des formats types BMP, JPEG, PNG, PPM, PDF, EPS, PS, afin de faire des images de qualité.

<https://sites.google.com/site/alloucheat/Home/gabedit/download>

<http://gabedit.sourceforge.net/home.html>

### **GTKDynamo**

GTKDynamo is free/open source software which, together with pDynamo, transforms PyMOL into a powerful interface for molecular modeling.

The interface has been designed to facilitate determining reaction pathways in biological systems, specially using hybrid QC/MM (or QM/MM) methods.

PyMol has been chosen as a graphical interface to pDynamo because it has a python API with wide documentation available. The code has been written

by José Fernando R. Bachega, under advertisement of prof. Richard Charles Garratt and Dr. Troy Wymore, and a tremendous contribution from Dr. Martin Field.

<https://sites.google.com/site/gtkdynamo/>

### **PyMol**

<http://pymol.org/educational/>

### **ACD/ChemSketch for Academic and Personal Use**

#### **ACD/NMR Processor Academic Edition**

Free NMR processing software for academic and non-commercial use only.

ACD/NMR Processor Academic Edition has basic and advanced functions for processing 1D and 2D NMR data from any instrument quickly and efficiently.

Use ACD/NMR Processor at the instrument, or away from the lab, to carry out basic spectral manipulations, attach chemical structures and assign correlations,

handle spectral series, add or subtract spectra, and much more. ACD/NMR Processor Academic Edition includes ACD/ChemSketch Freeware and all of the same processing

features of ACD/NMR Processor

[http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr\\_proc/](http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr_proc/)

### **Logiciels pour la physique chimie :**

<http://www.xplora.org/downloads/Knoppix/>

**Yasaka** permet l'utilisation d'outils de représentation et manipulation de structures 3D de macromolécules et à son langage de scripting YANACONDA.

<http://www.yasara.org/>

<http://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services/PMG/PMGtuto.html>

### **Dozzaqueux - 3.10**

[http://jeanmarie.biansan.free.fr/telechargement/lazarus/dozzaqueux/3.40/installateur\\_dozzaqueux\\_windows\\_3.40.exe](http://jeanmarie.biansan.free.fr/telechargement/lazarus/dozzaqueux/3.40/installateur_dozzaqueux_windows_3.40.exe)

Export de Dozzaqueux dans Excel ®Exporter au format .csv et ouvrir dans Excel.

<http://jeanmarie.biansan.free.fr/dozzaqueux.html>

### **DosA**

Il vous fait:

- le tracé par la méthode des tangentes.
- la dérivée  $dpH/dV$
- le diagramme des % en acide et base pendant le dosage.
- Il utilise les indicateurs colorés
- Il lisse la courbe
- Il a la possibilité de choisir les courbes visibles,
- Il y a un pointeur donnant les coordonnées
- Possibilité de définir les échelles des axes en mm avant l'impression
- Exportation des graphes comme image vers le presse-papier ou vers un fichier, aux formats Bitmap, Jpeg ou Métafichier, avec dans ce dernier cas la possibilité de définir les échelles des axes en mm
- Possibilité de modifier les couleurs du fond, des titres...

DosA permet de tracer des courbes d'évolution de pH et des diagrammes de distribution pour divers types d'expériences impliquant des acides et des bases en solution aqueuse : titrage, dilution, mélange tampon.

Les courbes sont déterminées par simulation, ou à partir de données expérimentales fournies par l'utilisateur. Le logiciel permet de superposer des courbes, d'ajouter des commentaires, d'imprimer, copier vers le presse-papier, sauvegarder les graphes. Un curseur ou un pointeur, selon le cas, permettent de connaître les coordonnées des points.

<http://www.scientillula.net/logiciels/dosa/dosa.html>

<http://scientillula.net/logiciels/dosa/DosAlogiciel.zip>

### **KlechKz**

KlechKz est un logiciel qui permet d'illustrer graphiquement la structure électronique d'un atome.

Il peut être utilisé en classe de seconde pour introduire la notion de couche électronique.

Il permettra aux élèves curieux de s'intéresser "au cas du K" : le potassium est en effet le premier atome, dans la classification périodique des éléments,

dont la structure électronique ne s'explique qu'en dépassant la notion de saturation d'une couche.

<http://www.spc.ac-aix-marseille.fr/labospc/IMG/zip/KlechKz-2.zip>

### **wink**

Diffusé gratuitement sur internet, le logiciel Wink permet de créer des tutoriels et des présentations à partir de captures d'écran.

Une fois l'assistant de création de projet lancé, il suffit de presser la touche "Pause" du clavier pour enregistrer autant d'images clés que souhaité, Wink mémorisant en parallèle les déplacements de la souris.

A la fin de l'enregistrement, le logiciel compile toutes ces informations pour créer une animation flash qui simule l'utilisation de l'ordinateur au cours de la période d'enregistrement.

Les déplacements de souris sont alors visibles et l'animation flash donne l'impression que c'est une petite vidéo qui a été enregistrée à la place des captures d'écran successives.

Dans le cadre du B2I, on peut créer des tutoriels expliquant comment réaliser telle ou telle compétence du B2I. Lorsqu'un élève est bloqué, il peut consulter le tutoriel lui expliquant comment réaliser la manipulation.

Lien de téléchargement du logiciel : <http://www.debugmode.com/wink/>

### **Pour la physique**

Vous propose de télécharger 12 logiciels essentiellement pédagogiques en sciences physiques et chimiques. Mais il vous propose également un logiciel très convivial de création de trombinoscopes TROMBI, ainsi qu'un logiciel de création d'étiquettes pour les substances chimiques dangereuses  
<http://www.sciences-edu.net/>

### **Complément Microsoft Mathematics 2013 pour Word et OneNote**

Le Complément Microsoft Mathematics 2013 pour Microsoft Word et Microsoft OneNote facilite la création de graphiques en deux et en trois dimensions, résout les équations ou les inégalités et simplifie les expressions algébriques dans vos documents Word et les blocs-notes OneNote.

<http://www.microsoft.com/fr-fr/download/details.aspx?id=36777>

### **Microsoft Mathematics 4.0 enfin disponible en Français (gratuit)**

Pour rappel, Microsoft Mathematics 4.0 offre une série d'outils mathématiques permettant aux étudiants d'effectuer leurs travaux scolaires rapidement et aisément.

Grâce à Microsoft Mathematics 4.0, les étudiants peuvent résoudre des équations pas à pas tout en acquérant une meilleure connaissance des concepts fondamentaux

de pré-algèbre, algèbre, trigonométrie, physique, chimie et calcul.

Microsoft Mathematics 4.0 comprend une calculatrice graphique multifonction conçue pour fonctionner comme une calculatrice portable. D'autres outils informatiques

vous aident à évaluer les triangles, à effectuer des conversions d'un système d'unités à un autre et à résoudre les systèmes d'équations.

<http://www.microsoft.com/fr-fr/download/details.aspx?id=15702>

### **sagemath**

**Sage est un logiciel libre de mathématiques sous licence GPL. Il combine la puissance de nombreux programmes libres dans une interface commune basée sur le langage de programmation Python.**

Mission: *Création d'une alternative viable libre et open source à Magma, Maple, Mathematica et Matlab.*

Sage permet de faire des mathématiques générales et avancées, pures et appliquées. Il couvre une vaste gamme de mathématiques, dont l'algèbre, l'analyse, la théorie des nombres, la cryptographie, l'analyse numérique, l'algèbre commutative, la théorie des groupes, la combinatoire, la théorie des graphes, l'algèbre linéaire formelle, etc ...

Il permet l'utilisation simultanée et transparente de [dizaines de logiciels spécialisés](#). Il est conçu pour l'éducation ou les études autant que pour la recherche.

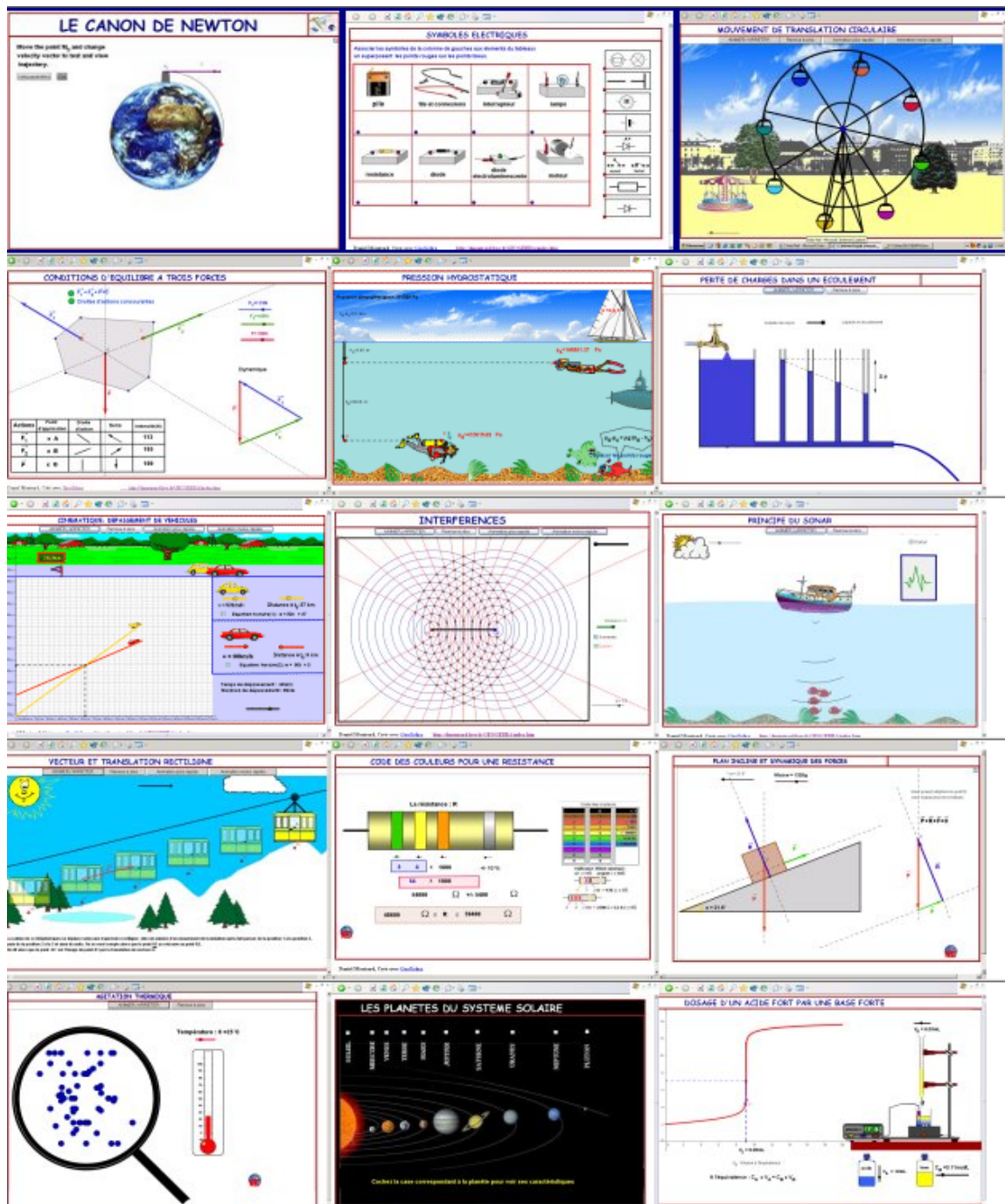
<http://wiki.sagemath.org/GroupeUtilisateursParis>

<http://www.sagemath.org/>

### **geogebra**

<http://www.geogebra.org/download>

<http://dmentrard.free.fr/GEOGEBRA/Sciences/accueilsce.htm>



ISN

### REPRESENTATION DES ATOMES PAR LE MODELE DE LEVY

REPRESENTATION DES ATOMES PAR LE MODELE DE LEVY

### CYCLE DE L'EAU

CYCLE DE L'EAU

### LA CLASSIFICATION DES ELEMENTS

LA CLASSIFICATION DES ELEMENTS

### ESTIMATION D'UN pH PAR ENCAREMENT

ESTIMATION D'UN pH PAR ENCAREMENT

### OXYDOREDUCTION

OXYDOREDUCTION

### LES LISTENDES EN CHARGE

LES LISTENDES EN CHARGE

### AMMATION SUR LA LOI D'OHM

AMMATION SUR LA LOI D'OHM

### ASSOCIATIONS: SCHEMA - NOM

ASSOCIATIONS: SCHEMA - NOM

### TRANSISTOR EN AMPLIFICATION

TRANSISTOR EN AMPLIFICATION

### MESURE DE LA PRESSION ATMOSPHERIQUE (BAROMETRE A JEROSUIT)

MESURE DE LA PRESSION ATMOSPHERIQUE (BAROMETRE A JEROSUIT)

### MESURE DE LA PRESSION HYDROSTATIQUE (MANOMETRE)

MESURE DE LA PRESSION HYDROSTATIQUE (MANOMETRE)

### PUSSEE D'ARCHIMEDE

PUSSEE D'ARCHIMEDE

### CARACTERISTIQUES EN ALTERNATIF

CARACTERISTIQUES EN ALTERNATIF

### COURBE DE L'ALTERNATIF

COURBE DE L'ALTERNATIF

### CARACTERISTIQUES DE L'ALTERNATIF

CARACTERISTIQUES DE L'ALTERNATIF

## ISN

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

Programmez un robot et apprenez les bases de la programmation.

Vous dessinez l'organigramme du programme.

Vous lancez le programme et vous voyez le robot exécuter votre programme.



RobotProg

## LighTTable

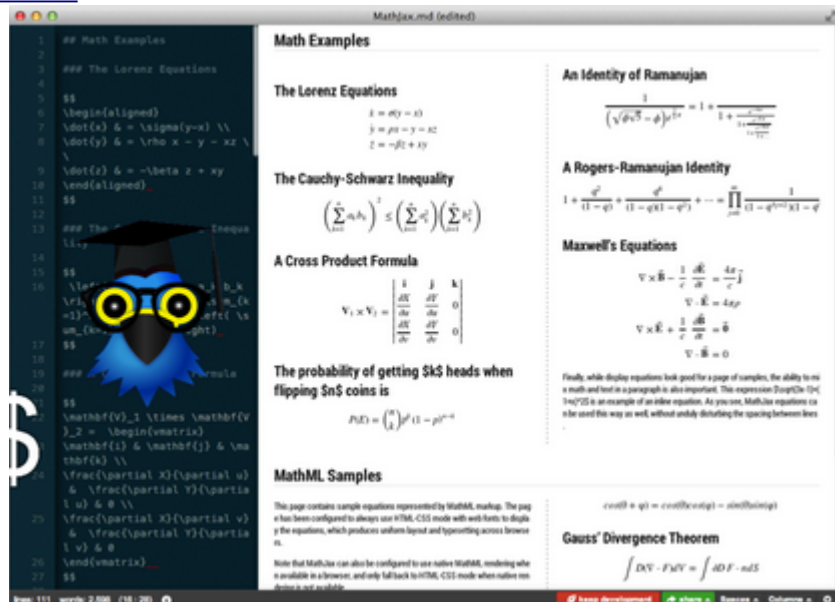
Le projet Light Table est une surface de développement et de simulation d'application qui élimine tous les outils et fonctionnalités encombrants dans les IDE actuels.

<http://lighttable.com/>

## Haroodpad

Toute personne ayant à rédiger dans un format dit "web-compatible" connaît le [Markdown](#). Il s'agit d'un langage offrant une syntaxe ultra simple à lire et à écrire, tout en favorisant l'export vers du [HTML](#) à la volée.

<http://pad.haroopress.com/>



## IPython

<http://nbviewer.ipython.org/github/ipython/ipython/blob/2.x/examples/Index.ipynb>

IPython est un des outils qui me font trouver la programmation Python plus agréable que dans tous les autres langages :

un shell avec tellement d'astuces intégrées que ça donne envie de vomir des arc-en-ciel.

Si vous êtes scientifique ou manipulez pas mal de graphiques et de données numériques, c'est très bien.

Un fantastique outil d'éducation, c'est génial pour les cours, les démos, et expérimenter avec du code inconnu.

Ça se présente sous la forme d'un shell IPython intégré dans une page Web, mais que l'on peut avoir sur son desktop,

pas besoin d'avoir un serveur distant. Si vous avez un peu de temps, voici une vidéo de démo (avec un musique horrible) :

<http://nbviewer.ipython.org/>

## anaconda pour un environnement python sous windows

Un environnement de développement Python est constitué de différents outils et composants Les chapitres qui

<http://continuum.io/downloads>