

OpenBabel et Jmol

OpenBabel

[OpenBabel](#) est un ensemble de programme permettant de manipuler et convertir les fichiers de description de molécules dans différents formats.

- Site officiel : http://openbabel.org/wiki/Main_Page
- Interfaçage en Python : <http://openbabel.org/wiki/Python>

Pour utiliser OpenBabel en python, il faut installer au préalable ces outils. Sous Linux (Debian, Ubuntu,...), installer les paquets openbabel et python-openbabel. Sous Windows, voir [cette page](#), et [celle-ci](#) (lien avec python).

Jmol

[Jmol](#) est un logiciel libre de visualisation de structures chimiques en 3D, écrit en Java et donc multi-plateformes (Windows, Mac OS X, Linux,...).

C'est un programme idéal pour visualiser des molécules dont les fichiers de description ont été obtenus par OpenBabel (ou d'autres logiciels de chimie).

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

Exemple de programme Python

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# génération à partir du code smile d'alcools ddes caractéristiques 3D
# et de fichiers .pdb lisible par Jmol
# références :
# http://openbabel.org/wiki/Python
#
http://openbabel.org/docs/current/UseTheLibrary/PythonDoc.html#using-iterato
rs
#
http://pythonchem.blogspot.be/2012/08/fun-and-little-disappointment-with.htm
l
# https://gist.github.com/cstein/3294891
# http://nullege.com/codes/search/openbabel

import openbabel

def OBMolMinimize(mol):
    """Minimize a molecule
    """
    ff = openbabel.OBForceField.FindForceField("MMFF94")
    ff.Setup(mol)
```

```
ff.ConjugateGradients(100, 1.0e-5)
ff.GetCoordinates(mol)
return mol

def OBStructureFromSmiles(smilesstring, filename=None):
    mol = openbabel.OBMol()
    obConversion = openbabel.OBConversion()
    obConversion.SetInAndOutFormats("smi", "pdb")
    obConversion.ReadString(mol, smilesstring)
    mol.AddHydrogens()
    builder = openbabel.OBBuilder()
    builder.Build(mol)
    mol = OBMolMinimize(mol)
    if filename is None: return mol
    # save structures in subfolder molecules
    obConversion.WriteFile(mol, "molecules/%s.pdb" % filename)

def getAlcohols():
    molecules = dict()
    molecules['methanol'] = 'CO'
    molecules['ethanol'] = 'CCO'
    molecules['1-propanol'] = 'CCCO'
    molecules['isopropanol'] = 'CC(O)C'
    molecules['n-butanol'] = 'CCCCO'
    molecules['butan-2-ol'] = 'CC(O)CC'
    molecules['isobutanol'] = 'CC(C)CO'
    molecules['tert-butanol'] = 'CC(C)(C)O'
    molecules['1-Pentanol'] = 'CCCCCCO'
    return molecules

if __name__ == '__main__':

    etab = openbabel.OBElementTable()
    dico = getAlcohols()
    for elem in dico:
        OBStructureFromSmiles(dico[elem], elem)

    # Determine the charge of a molecule
    for file_in in dico:
        obConversion = openbabel.OBConversion()
        obConversion.SetInFormat("pdb")
        mol = openbabel.OBMol()
        obConversion.ReadFile(mol, "molecules/%s.pdb" % file_in)
        # get the charges of the atoms
        charge_model = openbabel.OBChargeModel.FindType("MMFF94")
        charge_model.ComputeCharges(mol)
        partial_charges = charge_model.GetPartialCharges()
        print file_in, '- Formula = ', mol.GetFormula()
        print 'mol wt = ', mol.GetMolWt(), '- Numb atoms = ',
mol.NumAtoms(), '- Numb bonds = ', mol.NumBonds()
```

```
for atom in openbabel.OBMolAtomIter(mol):
    z=atom.GetAtomicNum()
    v3=atom.GetVector()
    print atom.GetAtomicMass(), z, etab.GetSymbol(z),
'x=',v3.GetX(), 'y=',v3.GetY(), 'z=',v3.GetZ()
    print 'partial charges = ', partial_charges
    print 'total charge = ', "%i" % int(sum(partial_charges))
    print '*****'
```

Pour le méthanol, ce programme sort ces informations :

```
methanol - Formula = CH4O
mol wt = 32.04186 - Numb atoms = 6 - Numb bonds = 5
12.0107 6 C x= 0.956 y= -0.086 z= -0.056
15.9994 8 O x= 0.488 y= -1.374 z= 0.299
1.00794 1 H x= 0.587 y= 0.64 z= 0.672
1.00794 1 H x= 0.584 y= 0.177 z= -1.05
1.00794 1 H x= 2.049 y= -0.08 z= -0.052
1.00794 1 H x= 0.831 y= -1.996 z= -0.365
partial charges = (0.28, -0.68, 0.0, 0.0, 0.0, 0.4)
total charge = 0
```

References

- [Open Babel: An open chemical toolbox](#), Noel M O'Boyle, Michael Banck, Craig A James, Chris Morley, Tim Vandermeersch and Geoffrey R Hutchison, Journal of Cheminformatics 2011, 3:33 doi:10.1186/1758-2946-3-33
- [InChI, the IUPAC International Chemical Identifier](#) Stephen R Heller, Alan McNaught, Igor Pletnev, Stephen Stein and Dmitrii Tchekhovskoi, Journal of Cheminformatics 2015, 7:23 doi:10.1186/s13321-015-0068-4

From:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:openbabel_jmol

Last update: **2015/06/16 12:28**

