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

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

En construction...

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

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:openbabel_jmol?rev=1392714314

Last update: **2014/02/18 10:05**