

Information recherche romain

mercredi 25 septembre 2024 16:38

Librairie Java/Javascript pour dessiner une molécule (ChemSketch) :

[Dessiner]

Option A : JSME Molecular Editor (<https://jsme-editor.github.io/>) - Javascript - Utilisation open source github

ChemDoodle Web Components

3Dmol.js

OpenChemLib.js

Option : Marvin JS (Système d'API WEB / Javascript API) : (<https://marvinjs-demo.chemaxon.com/latest/>)
Dossier Zip d'une version sans licence.

Kekule.js

[Importer]

Option A : JSmol (http://wiki.jmol.org/index.php/Main_Page) -> { [JSmol on a webpage - simple tutorial](#) }



Option Z : Exporter les images des molécules avec ChemSketch pour les importer sur notre solution.

Pas focus que sur javascript, regarder sur d'autre éléments.

Ketcher

➤ Langage : JavaScript

Open Babel

Langage : C++ (avec des interfaces Python et d'autres langages)

RDKit

Langage : Python

Bêtes à cornes :

Outil automatisé de calcul et représentation graphique

- A qui mon produit rend-il service ?

➤ Utilisateur

- Sur quoi agit mon produit ?

➤ Le traitement des données

➤

➤ C

- Quel est le but de mon produit ?

➤ Faciliter & optimiser le travail

➤

➤ C

Recherche scientifique traite des solutions existantes pour accéder à une grosse base de donnée avec un coup environnemental conséquent.

Article qui traite de chimie verte.

Les calculs de chimie verte

Indicateur utilisé

Valeur utilisé