


# Prise en main de jmol

R. Hatterer 18/09/19

## 1. Application Jmol

L'application Jmol est la version de Jmol qui s'exécute en tant que programme java dans sa propre fenêtre (par opposition à une applet qui s'exécute dans un navigateur). Ce programme est écrit dans un langage de programmation appelé java, qui nécessite l'installation d'une machine virtuelle Java sur votre ordinateur si ce n'est pas déjà fait. Cette MVJ est disponible pour les principaux systèmes d'exploitation tels que Windows, MacOS et Linux. La version présentée ici est la 14-29-52.

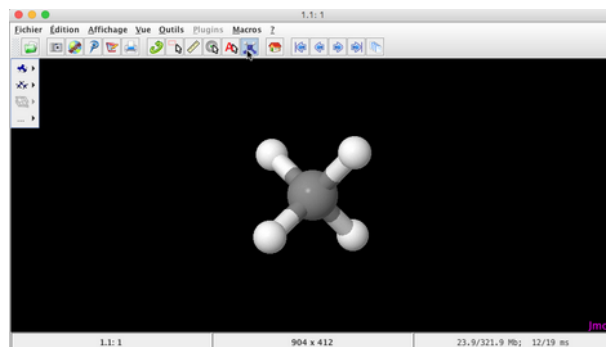
Pour lancer l'application Jmol, double cliquer sur le fichier  Jmol.jar

## 2. Menus

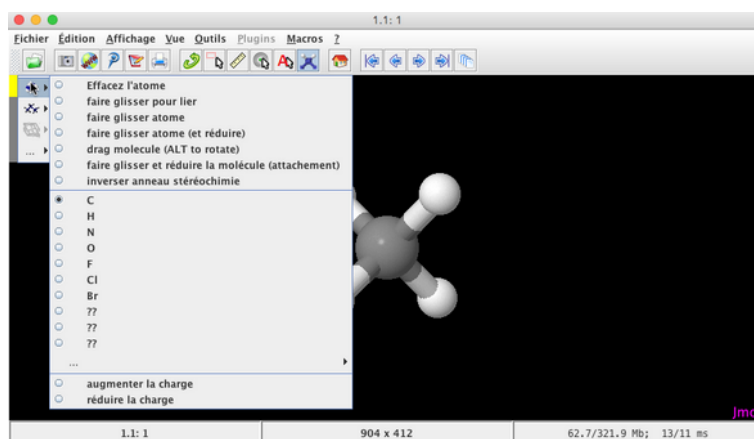
- a) Un menu classique et des icônes se trouvent en haut de la fenêtre.

Pour commencer à dessiner une nouvelle molécule, cliquer sur l'**icône en forme de molécule pour ouvrir le kit de modèles** ; une molécule de méthane apparaît.

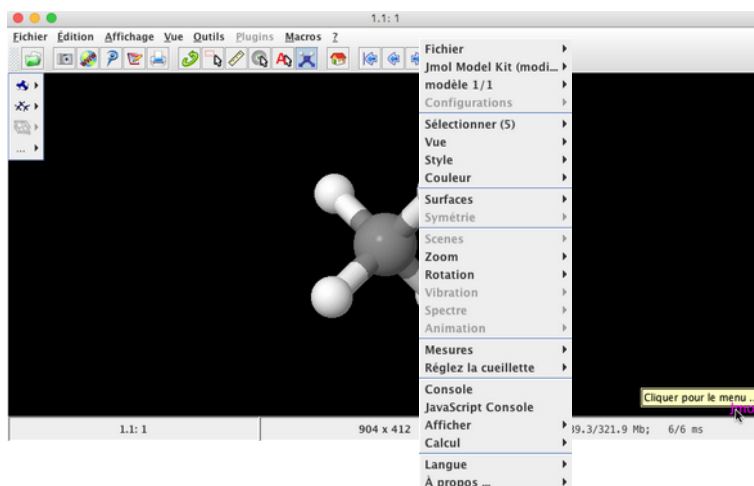
On peut la faire tourner pour étudier sa géométrie.



- b) Un **menu spécifique au kit de modèles** est disponible (à gauche). S'il disparaît, on peut le faire réapparaître soit en cliquant sur la barre verticale se trouvant sur la gauche de l'image soit avec un clic droit sur le fond noir de l'image.



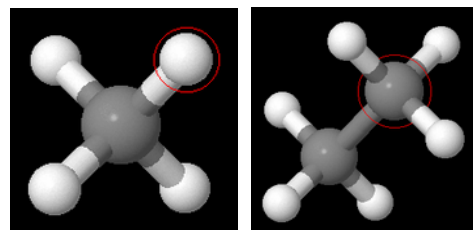
- c) Menu supplémentaire : **Jmol** (à droite au bas de l'image) donne accès à un menu supplémentaire.



### 3. Changer le comportement par défaut

#### a) Remplacer un atome par un autre

Par défaut, quand on clique sur un atome (par exemple un atome d'hydrogène de la molécule de méthane) celui-ci se transforme en atome de carbone avec ses hydrogènes (donc - H est remplacé par - CH<sub>3</sub>).



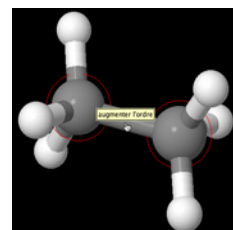
Le menu jaune  du kit de modèle (voir paragraphe 2b) permet de choisir l'atome de substitution.

#### b) Liaisons multiples


Quand on pointe convenablement le centre d'une liaison entre deux atomes, les deux atomes se trouvent cerclés en rouge. Par défaut, cliquer va changer l'ordre des liaisons selon le cycle suivant :

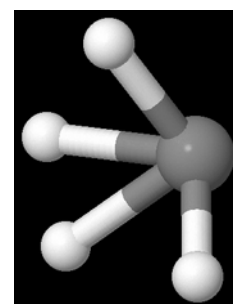
*liaison simple → liaison double → liaison triple → liaison simple → etc.*

Ce comportement par défaut peut être changé dans le menu bleu  du kit de modèles.




#### c) Déplacer un atome

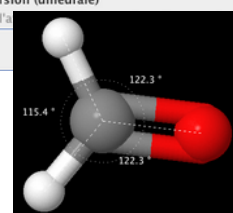
Par défaut, quand on clique sur un atome et que l'on cherche à le déplacer (par exemple un atome d'hydrogène de la molécule de méthane) celui-ci est effacé pas déplacé. Pour pouvoir le déplacer, il faut au préalable choisir « faire glisser atome » dans le menu jaune  du kit de modèle (voir paragraphe 2b).



#### d) Mesurer un angle

Par défaut, l'outil mesure permet de mesurer des distances. Pour mesurer des angles, il faut au préalable choisir « Cliquer pour une mesure d'angle » dans le menu  (voir paragraphe 2c).


Mesures	✓ Afficher les mesures
Régler la cueillette	Double-clic commence et finit toutes les mesures
Console	Cliquer pour une mesure de distance
JavaScript Console	Cliquer pour une mesure d'angle
Afficher	Cliquer pour une mesure de torsion (dihédrale)
Calcul	Cliquez sur deux atomes afin d'a
Langue	Effacer les mesures
À propos ...	Donner la liste des mesures



### 4. Reconstruire la géométrie de la molécule

Selon la théorie VSEPR de Gillespie, les électrons de la couche de valence des atomes, composent **des doublets** liants ou non liants **qui exercent les uns sur les autres des forces électriques répulsives**. Les doublets sont donc disposés autour de chaque atome de façon à minimiser les valeurs de ces forces (et l'énergie de la molécule).

#### a) Reconstruire la géométrie en cliquant :

La commande qui permet de reconstruire la géométrie en cherchant à réduire l'énergie de la molécule est la commande **Réduire** du menu blanc  du kit de modèles (voir paragraphe 2b).

#### b) Reconstruire la géométrie en entrant une instruction dans la console :

Une autre façon de déclencher le processus de minimisation de l'énergie de la molécule est :

- d'ouvrir la console par le menu Fichier > Console... ;
- d'y saisir, à la suite du \$, la commande « minimize » (valider avec la touche **Entrée**).

```

$ minimize
Initial MMFF E = 1432.765 kJ criterion = 0.004187 max steps = 100
MMFF Step 10 E = 52.180534 dE = -0.789002
MMFF Step 20 E = 51.955593 dE = -0.002804
MMFF Step 30 E = 51.866840 dE = -0.011232
MMFF Step 40 E = 51.698425 dE = -0.024191
MMFF Step 50 E = 51.373130 dE = -0.043920
MMFF Step 60 E = 50.725822 dE = -0.128660
MMFF Step 70 E = 49.458454 dE = -0.156348
MMFF Step 80 E = 37.821453 dE = -6.497657
MMFF Step 90 E = 0.827932 dE = -0.149035
MMFF Step 95 E = 0.036411 dE = -0.000151

MMFF STEEPEST DESCENT HAS CONVERGED: E = 0.15244 kJ after 95
steps
$
  
```

L'avantage de cette seconde méthode est l'affichage de l'énergie de la molécule. L'énergie est affichée en kJ/mol.

## 5. Afficher les doublets

### a) Figure de répulsion tétraédrique

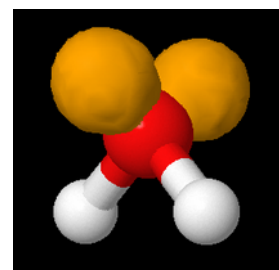
Une figure de répulsion tétraédrique est associée à une hybridation de type  $sp^3$  (notion hors programme) d'où le nom des commandes à utiliser.

Par exemple pour afficher les doublets non liants de l'oxygène dans la molécule d'eau  $H_2O$  :

- lancer Jmol ; ouvrir le kit de modèles (la molécule de méthane apparaît) ; choisir l'atome d'oxygène (dans le menu jaune du kit de modèles) ; cliquer sur l'atome de carbone (la molécule d'eau apparaît) ; déterminer la géométrie correcte de la molécule (pour cela, entrer la commande `minimize` dans la console qui s'ouvre à partir du menu Fichier > Console...) ;
- saisir successivement les instructions suivantes dans la console pour afficher les doublets c et d (a et b étant les liaisons avec les H) :
  - `select oxygen`
  - `lcaocartoon create sp3c`
  - `lcaocartoon create sp3d`

```

$ select oxygen
1 atomes sélectionnés
$ lcaocartoon create sp3c
$ lcaocartoon create sp3d
  
```

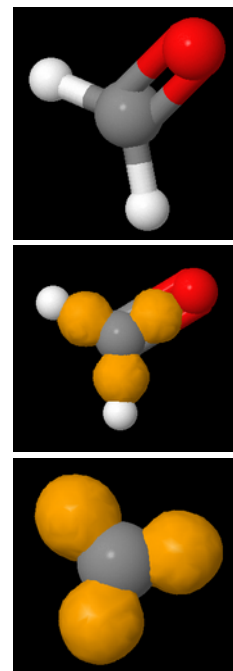


### b) Figure de répulsion triangulaire

Une figure de répulsion triangulaire est associée à une hybridation de type  $sp^2$ .

Pour l'afficher on peut faire :

- lancer Jmol ; ouvrir le kit de modèles (la molécule de méthane apparaît) ; choisir l'atome d'oxygène (dans le menu jaune du kit de modèles) ; cliquer sur un atome de d'hydrogène (la molécule de méthanol apparaît) ; cliquer sur la liaison simple entre C et O (la molécule de méthanal apparaît) ; reconstruire la géométrie correcte de la molécule (voir paragraphe 4b) ;
- saisir successivement les instructions suivantes dans la console pour afficher la figure de répulsion triangulaire autour du carbone :
  - `select carbon`
  - `lcaocartoon create sp2a`
  - `lcaocartoon create sp2b`
  - `lcaocartoon create sp2c`
  - `delete hydrogen`
  - `delete oxygen`

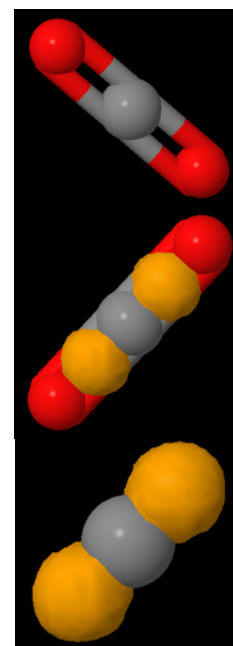


### c) Figure de répulsion linéaire

Une figure de répulsion triangulaire est associée à une hybridation de type sp.

Pour l'afficher on peut faire :

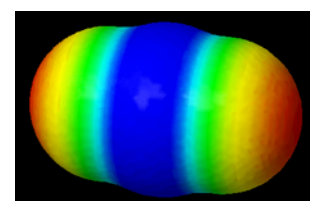
- lancer Jmol ; ouvrir le kit de modèles (la molécule de méthane apparaît) ; choisir l'atome d'oxygène (dans le menu jaune du kit de modèles) ; cliquer sur un atome de d'hydrogène (la molécule de méthanol apparaît) ; cliquer sur la liaison simple entre C et O (la molécule de méthanal apparaît) ; faire de même de l'autre côté pour faire apparaître la molécule de CO<sub>2</sub> ; déterminer la géométrie correcte de la molécule (`minimize` dans la console [Fichier > Console...]) ;
- puis pour afficher la figure de répulsion linéaire autour du carbone :
  - `select carbon`
  - `lcaocartoon create spa`
  - `lcaocartoon create spb`
  - `delete oxygen`



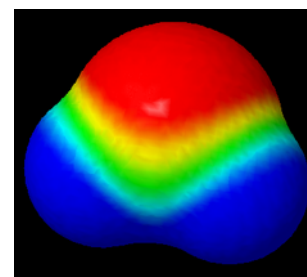
## 6. Polarité des molécules

Par exemple, pour afficher la polarité des molécules (MEP : Molecular electrostatic potentials) d'eau H<sub>2</sub>O et de dioxyde de carbone CO<sub>2</sub> :

- Créer la molécule :
  - pour la molécule d'eau : lancer Jmol ; ouvrir le kit de modèles (la molécule de méthane apparaît) ; choisir l'atome d'oxygène (dans le menu jaune du kit de modèles) ; cliquer sur l'atome de carbone (la molécule d'eau apparaît) ;



- pour la molécule de dioxyde de carbone : lancer Jmol ; ouvrir le kit de modèles (la molécule de méthane apparaît) ; choisir l'atome d'oxygène (dans le menu jaune du kit de modèles) ; cliquer sur un atome de d'hydrogène (la molécule de méthanol apparaît) ; cliquer sur la liaison simple entre C et O (la molécule de méthanal apparaît) ; faire de même de l'autre côté pour faire apparaître la molécule de CO<sub>2</sub> ;



- Reconstruire sa géométrie (voir le paragraphe 4)
- Ouvrir la console à partir du menu Fichier > Console...
- À la suite du \$ qui s'affiche dans la console, entrer l'instruction qui permet d'afficher la polarité de la molécule :

```
isosurface resolution 10 molecular mep
```

- Valider avec la touche **Entrée** du clavier.

## 7. Démonstrations

Un site pour découvrir la puissance de Jmol

<https://www.chemtube3d.com>

Sur ce site, utiliser sur le bandeau à droite de « Home » pour accéder à un tas d'animations (chimie organique, inorganique, structure...) réalisées avec Jmol.