

Jmol



Jmol est une applet java (open source) permettant de visualiser des structures chimiques en 3D ; mais pas seulement ! Un nouveau type de réponse `jmolclick` et un `slib chemistry/jmolshow` ont été créés pour incorporer une applet Jmol dans un exercice de WIMS.

<http://jmol.org>

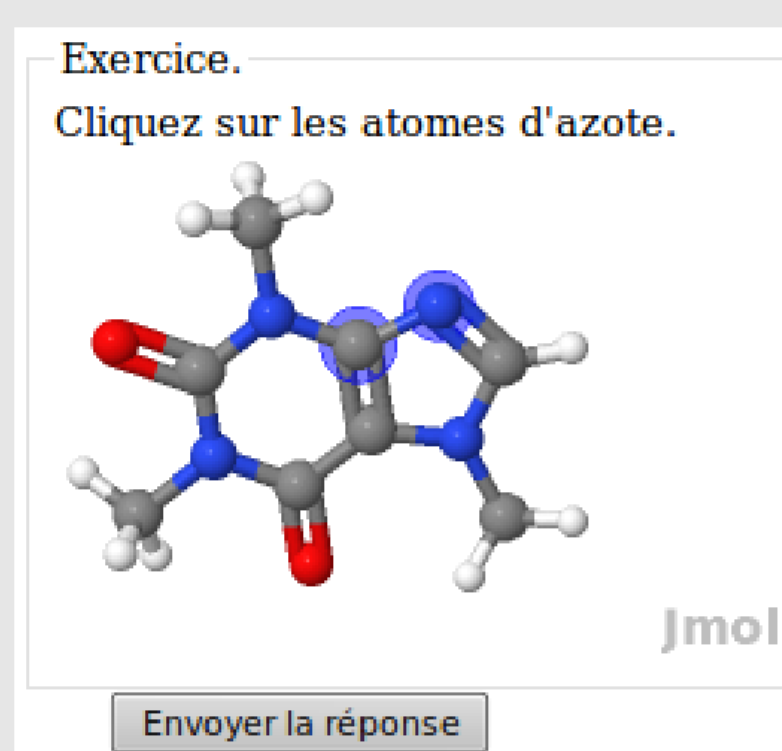
NB : Publiés début avril 2010. (Perrin-Riou & Noel)

La macro `jmolshow`

La macro `jmolshow` permet d'insérer la vue d'une structure dans un exercice. La réponse est extérieure à l'applet. Elle servira parfaitement pour des exercices du type "Quel est le nom de la molécule suivante ?".

Principe de `jmolclick`

L'énoncé contient (entre autre) la représentation d'une structure (molécule, cristal, polyèdre, ...). La réponse attendue est une sélection d'atomes. L'étudiant sélectionne un atome en cliquant dessus (et le désélectionne en cliquant à nouveau). L'orientation (et le zoom) de la structure peut évidemment être changée à la souris. Les atomes sélectionnés sont signalés par un halo bleu. Pour valider sa réponse, l'étudiant doit cliquer sur le bouton Envoyer la réponse.



Les formats de structures

Les formats de structures qui peuvent être utilisés dans l'applet sont ceux (très nombreux) reconnus par Jmol dont les plus courants sont : `pdb`, `mol`, `xyz`, `cif`, `jme` ...

Le chemin vers le fichier contenant la structure doit être spécifié dans la variable `file` de votre exercice `oef`. Vous pouvez aussi mettre le contenu du fichier dans cette même variable.

```
24
Caffeine
H -3.38041 -1.12723 0.57330
N 0.96682 -1.07374 -0.81982
C 0.05672 0.85271 0.39231
N -1.37517 -1.02122 -0.05705
C -1.26150 0.25907 0.52341
C -0.30683 -1.68363 -0.71693
C 1.13942 0.18741 -0.27009
N 0.56026 2.08390 0.82515
...
```

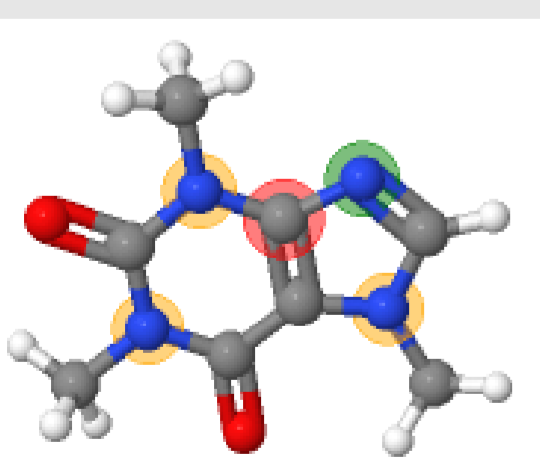
La bonne réponse

Elle peut être indiquée sous plusieurs formes :

- ▶ Une liste des numéros des atomes (séparés par des virgules) devant être sélectionnés.
- ▶ Une commande en langage Jmol correspondant à une sélection d'atomes.

La première possibilité est évidemment la plus simple à mettre en oeuvre mais la deuxième permet de spécifier autre chose que des numéros d'atomes (cf plus loin)

Affichage de la réponse



La réponse est analysée puis affichée avec les conventions suivantes :

- ▶ En rouge les propositions de l'étudiant qui sont erronées
- ▶ En vert les propositions de l'étudiant qui sont justes
- ▶ En orange les atomes faisant partie de la bonne réponse et non sélectionnés par l'étudiant

Analyse de votre réponse.
[1] : mauvaise réponse.

La note (/10) peut être calculée de plusieurs manières :

- ▶ par défaut : 10 quand la réponse est exactement celle attendue, 0 sinon.
- ▶ option `split` : $10 \times \left(\frac{nb_{exactes} - coeff \times nb_{inexactes}}{taille_{reponse}} \right)^2$
coeff vaut 2 mais peut être remplacé par 1 (option `eqweight`)

Exemple simple

```
\title{Exemple simple}
\text{file=data/caffeine.mol}

\text{enonce=Cliquez sur les
          atomes d'azote.}
\text{rep=8,21,2,4}

\statement{\enonce
  <center>
    \embed{r1, 300x300}
  </center>
}
\answer{{\rep;\file}{type=jmolclick}}
```

Titre
Chemin du fichier contenant la structure
Texte de l'énoncé

Numéros des atomes de la "bonne réponse"

La taille, ici 300x300 peut être changée

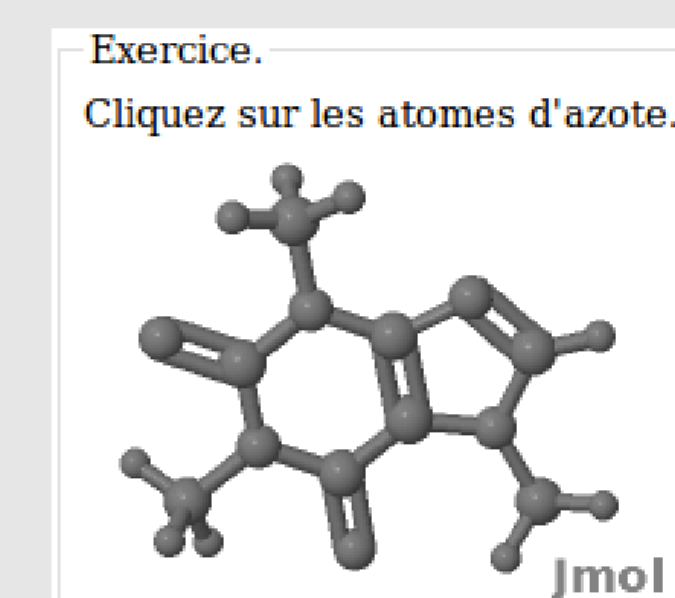
Des options peuvent être ajoutées

Personnalisation : Les scripts Jmol

L'apparence de la structure peut facilement être modifiée à l'aide de script Jmol. Trois scripts peuvent être spécifiés :

1. Un script qui sera exécuté lors de l'affichage de la question ET AUSSI lors de l'affichage de la question.
2. Un script qui sera exécuté UNIQUEMENT lors de l'affichage de la question.
3. Un script qui sera exécuté UNIQUEMENT lors de l'affichage de la réponse.

Ces scripts sont spécifiés (un par ligne) dans le champ `embed` après la taille de l'applet.



```
\embed{r1, 300x300
;
select all; color atoms gray;
;}
```

1^{ère} ligne : script commun (ici vide)
2^{ème} ligne : script question
3^{ème} ligne : script réponse (ici vide)

Dans cet exemple, tous les atomes sont gris lors de la question mais ont les mêmes couleurs que dans les exemples précédents lors de l'affichage de la réponse.

Le poster "Jmol : un tour d'horizon", détaille les principales commandes du langage de script. <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/> présente beaucoup d'exemples ainsi qu'une documentation complète interactive.

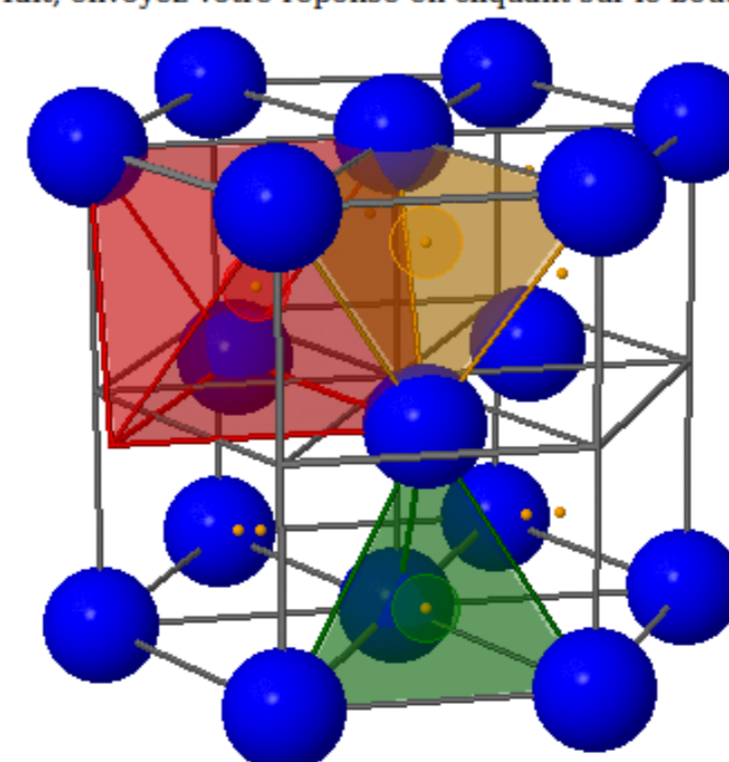
Les options de `jmolclick`

- ▶ `nb_select=xx` : Il est parfois intéressant de restreindre la taille de la réponse (nombre d'atomes à sélectionner).
- ▶ `noselect=_X` : Permet d'interdire la sélection d'un type d'atome (remplacer `x` par le symbole de l'élément)
- ▶ `split` : Change le `coeff` de 1 en 2 pour le calcul de la note (cf Affichage de la note)

Des exercices utilisant `jmolclick`

Sites tétraédriques et plan médian

Exercice.
Sur la figure suivante, parmi les sites tétraédriques et octaédriques représentés par des points oranges, sélectionnez (en cliquant dessus) 2 sites tétraédriques ayant en commun un sommet dans le plan médian. Pour désélectionner un site, il suffit de re cliquer dessus. Lorsque votre choix est fait, envoyez votre réponse en cliquant sur le bouton Valider.

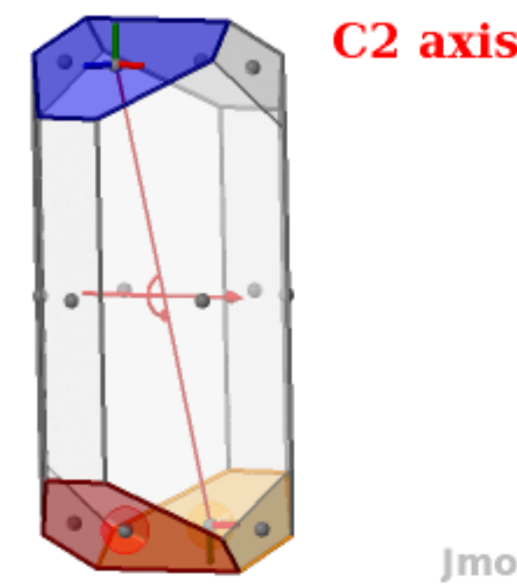


Analyse de votre réponse.
[1] : mauvaise réponse.

Exercice.
Sur le modèle ci-dessous, un opérateur de symétrie a été représenté selon la convention suivante :

- Axe de rotation : flèche rouge
- Miroir : plan vert
- Centre d'inversion : point orange

Indiquez l'image de la face bleue par l'opérateur de symétrie. Pour sélectionner une face, cliquez sur le bouton gris situé en son centre.



Analyse de votre réponse.
[1] : mauvaise réponse.

Dans les deux exemples ci-dessus l'affichage de la réponse a été modifié (lourdement pour l'exemple de droite) à l'aide de nombreuses commandes Jmol. Les codes couleurs restent les mêmes que précédemment.

NB : Ces exercices ne sont pas encore publiés.