



HAL
open science

Visualiser, toucher, déformer et assembler des nano-objets du bout des doigts

Marc Baaden

► **To cite this version:**

Marc Baaden. Visualiser, toucher, déformer et assembler des nano-objets du bout des doigts. Les nanotechnologies : un nouveau paradigme, Les Cahiers de l'ANR - n°5, 2012, pp.47. hal-03948139v2

HAL Id: hal-03948139

<https://hal.science/hal-03948139v2>

Submitted on 7 Feb 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

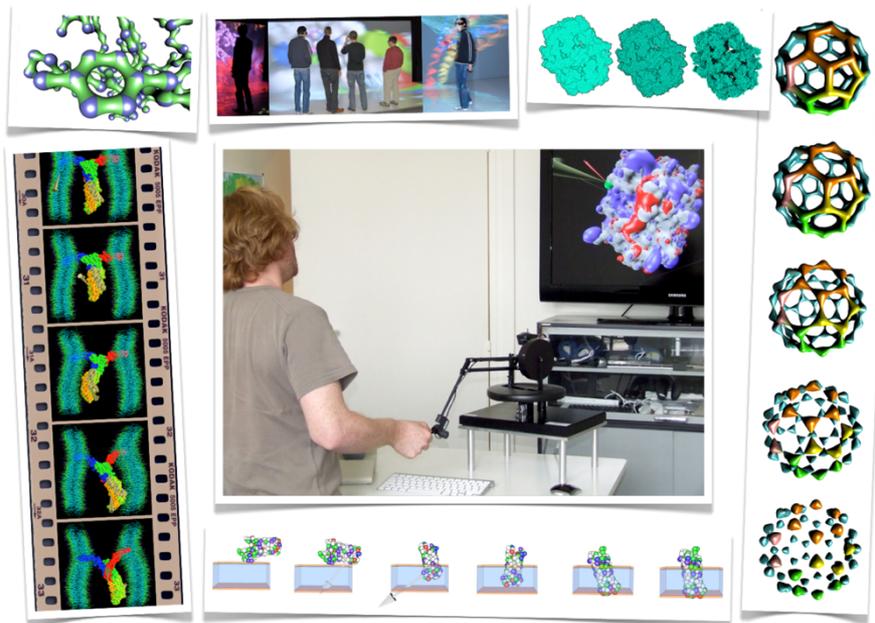
Visualiser, toucher, déformer et assembler des nano-objets du bout des doigts.

Un laboratoire virtuel pour étudier des molécules biologiques et des matériaux

Les dix dernières années ont apporté des progrès considérables en physique et en chimie appliquée à l'infiniment petit. Les nanotechnologies, étude d'objets de taille atomique et moléculaire, ont grandement profité de ces avancées. Ces nano-objets sont très difficiles à visualiser et à manipuler individuellement, c'est pourquoi, nos recherches portent sur le développement et l'utilisation de la visualisation et des simulations numériques afin de mieux appréhender ceux-ci. Les outils de visualisation à notre disposition permettent de mieux percevoir les formes souvent complexes d'édifices moléculaires de taille croissante tandis que les simulations que nous réalisons miment le comportement dynamique extrêmement complexe des molécules biologiques. Le but de ce travail est d'aboutir à un véritable laboratoire virtuel dédié à la manipulation de structures moléculaires sur ordinateur. Les retombées de cet outil concerneront la recherche à la fois fondamentale et appliquée dans le domaine des nanotechnologies, de la recherche biomédicale et des matériaux.

Visualisation, réalité virtuelle et simulations interactives au service de la compréhension des systèmes moléculaires

Pour explorer ce « LEGOTM » moléculaire, nous développons une approche pluridisciplinaire innovante, combinant simulations moléculaires et techniques issues de la réalité virtuelle et du graphisme par ordinateur. Dans cette approche, le chercheur observe en temps réel les mouvements qui animent ces molécules. Il peut ainsi saisir, allonger et manipuler ces molécules de manière interactive, pour étudier à la fois leur déformation et leur agencement, dont la compréhension est primordiale pour mettre en lumière les dysfonctionnements qui donnent naissance à des maladies. Ceci est facilité par une manipulation très intuitive: les molécules étant rendues palpables par un périphérique à retour d'effort. Nous avons appliqué cette méthode aux macrostructures moléculaires, notamment des groupes de protéines impliquées dans la fusion membranaire. Ces systèmes moléculaires de très grandes tailles (pouvant être composés de centaines de milliers voir de millions d'atomes) nous a amené à développer une visualisation adaptée appelée «HyperBalls». Les résultats obtenus en biologie structurale sont déjà prometteurs et d'autres domaines comme la physique des matériaux ou la conception de nano-objets bénéficient également de cette approche.



Le laboratoire « FVNano » en action. La partie centrale de l'image illustre une séance de travail typique. Autour de l'image quelques exemples de systèmes moléculaires étudiés, de la représentation « HyperBalls » et d'une séance immersive en salle de réalité virtuelle.

Le projet FVNANO est un projet de recherche académique coordonné par le laboratoire de biochimie théorique du CNRS. Il associe aussi le laboratoire d'informatique fondamentale de l'université d'Orléans (LIFO), le projet MOAIS de l'INRIA Grenoble et le CEA/DIF à Bruyères-le-Châtel. Le projet a commencé en janvier 2008 et dure 48 mois. Il bénéficie d'un financement ANR de 556 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

Résultats majeurs

Parmi les résultats marquants figure le travail accompli pour rendre notre logiciel performant, une nécessité pour son utilisation interactive. Différentes boucles de simulation, de visualisation et d'interaction coûteuses en calcul et intimement liées sont à agencer. La visualisation « HyperBalls » optimisée sur carte graphique est une avancée majeure. Notre outil est utilisé pour aborder plusieurs « grands déis » scientifiques : avancer dans la compréhension de maladies comme le botulisme, de phénomènes d'addiction liés au tabagisme, ou des processus comme la réparation de l'ADN endommagé.

Production scientifique et brevets

Plusieurs publications sont déjà parues, entre autres dans J. Comput. Chem., Nucleic Acids Res., J. Supercomputing, IEEE VR 2008, VRST'08, VRIPHYS'08, Briefings in Bioinformatics et Pacific Symposium for Biocomputing. Nos travaux ont également été présentés sous forme de communication orale, d'affiche ou de démonstration à de nombreuses manifestations scientifiques nationales et internationales. Plusieurs logiciels mis au point sont distribués.

Contact:

Marc Baaden

baaden@ibpc.fr

<http://www.baaden.ibpc.fr/projects/fvnano>