



HAL
open science

Illustration moléculaire en Chimie et Biologie : exemples, état de l'art et perspectives

Marc Baaden

► **To cite this version:**

Marc Baaden. Illustration moléculaire en Chimie et Biologie : exemples, état de l'art et perspectives. Du réel à l'image, Congrès de l'AEIMS, Nov 2011, Strasbourg, France. pp.74-78. hal-03948334

HAL Id: hal-03948334

<https://hal.science/hal-03948334v1>

Submitted on 20 Jan 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.

Illustration moléculaire en Chimie et Biologie : exemples, état de l'art et perspectives

Marc
Baaden

Depuis les travaux de Léonard de Vinci, l'illustration scientifique a beaucoup évolué : passant de simples dessins à des représentations de plus en plus sophistiquées et complexes au fur et à mesure que les connaissances avançaient. Le passage du niveau macroscopique au niveau microscopique se fait, dans la réalité, de façon continue, mais en pratique des disciplines comme l'illustration médicale et l'illustration moléculaire appartiennent encore à des mondes différents. Ceci peut s'expliquer par une grande variété des objets à représenter. Cependant on peut remarquer que certaines techniques employées dans ces deux domaines se ressemblent. De plus, il y a encore peu de temps, le monde des molécules nous était complètement invisible. Comme le disait Richard Feynman, à la fin des années 50, en parlant de ce nanomonde que l'on découvrait à peine : « Il y a plein de place en dessous » nous pourrions rajouter qu'il y a aussi plein de choses à voir ! Ici, nous parcourons cet univers au cœur de chacun pour voir comment les chercheurs tentent de le peindre. Dans le monde moléculaire, la représentation visuelle de la structure d'une molécule et de ses propriétés est primordiale : « Dis-moi ton agencement, je te dirai qui tu es ». Or ceci n'est possible que depuis relativement peu de temps : la modélisation moléculaire de macromolécules biologiques trouve ses origines au début des années 60 où Sir John Kendrew créait des modèles en fil de fer ou en pâte à modeler. Quelques années plus tard, Cyrus Levinthal et ses collègues

Chercheur au CNRS
à l'interface chimie-
biologie-informatique

Marc Baaden est un chimiste théoricien au CNRS à Paris, étudiant les approches de modélisation moléculaire interactives de systèmes biologiques complexes. la visualisation moléculaire représente une part essentielle de ces travaux alliant le calcul intensif et la réalité virtuelle, avec des perspectives particulièrement stimulantes offertes par les dernières générations de cartes graphiques.

du MIT utilisèrent un oscilloscope pour visualiser des modèles moléculaires également « en fil de fer » - décrits par de simples lignes. Depuis cette époque, les progrès techniques ont considérablement amélioré la visualisation moléculaire et les illustrations de molécules dans les articles scientifiques abondent. Les modèles dessinés « à la main » ont évolué pas à pas vers les images de synthèses actuelles.

Ces dernières années semblent marquer un tournant dans les possibilités de visualisation scientifique notamment sur le plan du réalisme et de la performance. Il est possible de visualiser de manière interactive des édifices moléculaires de taille croissante. Il faut souvent combiner différents types de représentations et de données pour mieux comprendre ces systèmes moléculaires. En ce qui concerne la performance, les moyens informatiques à notre disposition n'ont cessé d'évoluer, ce qui a grandement aidé les chercheurs à mieux appréhender leurs sujets d'étude. Un autre point important est d'essayer de ramener cet *invisible* à des notions compréhensibles. Pour cela, l'analogie avec des objets macroscopiques est très utile. C'est pourquoi il est important d'utiliser différentes techniques d'éclairage pour bien « mettre en lumière » les molécules et leurs formes complexes. Les avancées techniques ont permis de repenser le monde moléculaire.

Du fait des avancées technologiques et scientifiques, les données ne sont plus seulement statiques, mais dynamiques : grâce aux simulations numériques de la modélisation moléculaire, il est possible de générer de véritables films illustrant l'évolution des systèmes moléculaires. Ces simulations vont générer des quantités importantes de données qu'il sera nécessaire de traiter et de simplifier afin de les analyser. Cette analyse des données est vitale pour faire la différence entre les mouvements oscillatoires aléatoires et les mécanismes moléculaires importants. La simplification des données peut passer par le biais de l'abstraction pour ne représenter que certains éléments utiles aux recherches. Il est également possible d'utiliser des outils ordinairement dédiés à d'autres domaines comme l'industrie des jeux vidéo ou du cinéma afin de renforcer le caractère réaliste d'une animation. Les masses de données issues des simulations numériques requièrent des approches artistiques et pédagogiques afin de les rendre compréhensibles. Parfois, entre science et art, il n'y a qu'un petit pas. Les illustrations de systèmes moléculaires font souvent la une des journaux spécialisés où le caractère artistique est alors pris en compte. Les systèmes moléculaires ont souvent des



formes pouvant être source d'inspiration pour les artistes. Certains chercheurs ont même réalisé des illustrations pour des articles scientifiques qui finirent par se retrouver dans les musées ou les galeries.

L'évolution de la visualisation scientifique des systèmes moléculaires en chimie et en biologie ouvre à de possibles perspectives qui bénéficieraient du concours d'illustrateurs scientifiques.



a.

Une série de représentations moléculaires allant de modèles physiques à des modèles virtuels de plus en plus sophistiqués

A series of molecular representations going from physical models to more and more refined virtual models