

Bientôt dans votre amphithéâtre, la chimie fera son cinéma !

De la bonne utilisation des ressources informatiques pour l'enseignement : visualisation moléculaire, illustration de processus chimiques et de modèles physiques

Matthieu Chavent, Marc Baaden, Éric Hénon et Serge Antonczak

Résumé La chimie traite du monde moléculaire, abstrait à notre échelle. La représentation d'un objet chimique, du simple trait à la réalité augmentée, est devenue un outil pédagogique essentiel. Ces illustrations statiques ou dynamiques, indispensables en recherche, s'appuient sur des données expérimentales ou issues de calculs. Elles forment un pont idéal entre les connaissances accumulées en recherche et un contenu pédagogique, donnant l'occasion de mettre en lumière de manière efficace, au-delà des objets eux-mêmes, les modèles physiques qui gouvernent leur comportement. L'intégration de toutes ces ressources numériques au sein de l'enseignement supérieur est importante dès la première année. Au-delà de la simple mise à disposition, l'interaction encadrée de l'étudiant avec ces ressources et l'utilisation, même basique, des outils de calcul qui les ont générées, renforcent la compréhension des notions apprises et l'intérêt de l'étudiant pour la discipline.

Mots-clés Visualisation moléculaire, processeur graphique (GPU), chimie théorique, contenu pédagogique numérique, MIEC-JIREC 2011, enseignement.

Abstract **Soon in your lecture halls, chemistry will go to Hollywood. On the appropriate use of computational resources for teaching: molecular visualization, illustrating chemical processes and physical models** Chemistry describes the molecular world, an abstract entity at the human scale. The representation of a chemical object, from a simple sketch to augmented reality, is an essential tool to stimulate the senses, learning and understanding of fundamental mechanisms. Such static or dynamic illustrations, essential for research, build upon experimental or computational data. They represent an ideal bridge between accumulated research findings and educational contents, opening the possibility to efficiently depict – beyond the objects themselves – physical models that govern their behavior. Integrating these numerical resources within higher education is crucial from the very beginning. Beyond simply providing access to such data, guided interaction of the student with these resources and the use – even in a basic form – of the computational tools that generated them, reinforce the understanding of previously acquired fundamentals and the interest of the student for the topics.

Keywords **Molecular visualization, graphics processing unit (GPU), theoretical chemistry, numerical pedagogic materials, MIEC-JIREC 2011, teaching.**

Visualisation moléculaire

La représentation visuelle de la structure d'une molécule et de ses propriétés est centrale dans l'enseignement de la chimie ainsi qu'en recherche. Cette première partie illustre l'évolution récente en visualisation scientifique de systèmes moléculaires, que ce soit avec des dispositifs très courants ou par des technologies de l'industrie du jeu vidéo.

Bref historique

La représentation visuelle de macromolécules biologiques trouve ses origines au début des années 1960 quand Sir John Kendrew fabriquait des modèles en fil de fer ou en pâte à modeler comme outils de recherche. Quelques années plus tard, en 1964, l'utilisation des ordinateurs démarra avec Cyrus Levinthal et ses collègues du MIT qui, à l'aide d'un oscilloscope, animèrent 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 laissé la place aux images de synthèse que tout le monde peut aisément créer, même sur des ordinateurs de configuration modeste (voir *figure 1*).

De la visualisation de maillages au lancer de rayons sur cartes graphiques

Ces dernières années semblent marquer un tournant dans les possibilités de visualisation scientifique, notamment sur le plan du réalisme et de la performance [1]. Par exemple, il est possible de visualiser de manière interactive des édifices moléculaires de taille croissante. Pour cela, il faut souvent combiner différents types de représentations et de données pour mieux appréhender ces systèmes moléculaires. En ce qui concerne la performance, les moyens informatiques à notre disposition n'ont cessé

Glossaire

Les termes suivis d'un astérisque* dans le texte sont définis ci-dessous.

Avatar : personnage ou objet virtuel (dans un jeu vidéo, sur Internet ou plus généralement dans un environnement virtuel) représentant un utilisateur ou un objet réel.

Chimie computationnelle : il s'agit d'une branche de la chimie et/ou de la physico-chimie qui utilise les lois de la chimie théorique exploitées dans des programmes informatiques spécifiques afin de calculer structures et propriétés d'objets chimiques.

Coordonnées cartésiennes : valeurs réelles x , y et z permettant de déterminer la position d'un point dans l'espace défini par un repère cartésien.

Dispositif haptique : l'haptique, du grec *haptomai* qui signifie « je touche », désigne la science du toucher, par analogie avec l'acoustique ou l'optique. Un dispositif haptique permet donc de toucher un objet virtuel par l'intermédiaire de bras à retour de force par exemple.

État de transition : « point haut » le long du chemin d'énergie minimum, ou plus précisément, point de selle d'ordre un sur la surface d'énergie potentielle.

Lancer de rayons sur cartes graphiques : le lancer de rayons (en anglais « ray tracing ») est une technique de rendu en image de

synthèse simulant le parcours inverse de la lumière ; on calcule les éclairages de la caméra vers les objets, puis vers les lumières, alors que la lumière va de la scène vers l'œil. L'approche peut être utilisée pour calculer des surfaces afin de diminuer le temps de calcul (on parle alors de « ray casting »). Ces techniques sont particulièrement adaptées aux calculs sur la carte graphique.

Méthode VSEPR (« valence shell electron pair repulsion ») : méthode permettant de prédire qualitativement la géométrie de molécules en minimisant les répulsions des paires d'électrons de la couche de valence des atomes constituant cette molécule.

Modèles physiques : objets 3D réels, en général en bois ou en plastique, permettant de représenter les atomes par des sphères et les liaisons interatomiques par des cylindres.

Réaction de type Diels-Alder : réaction de cycloaddition concertée de type [4+2], qui permet d'obtenir un motif cyclohexadiène à partir d'un alcène et d'un diène.

Réalité augmentée : désigne les systèmes informatiques qui rendent possible la superposition d'un modèle virtuel 3D ou 2D à la perception que nous avons naturellement de la réalité, et ceci en temps réel.

Triangulation de surface : technique informatique permettant d'approximer la surface de l'objet par des milliers, voire des millions de triangles, ce qui est parfois coûteux.

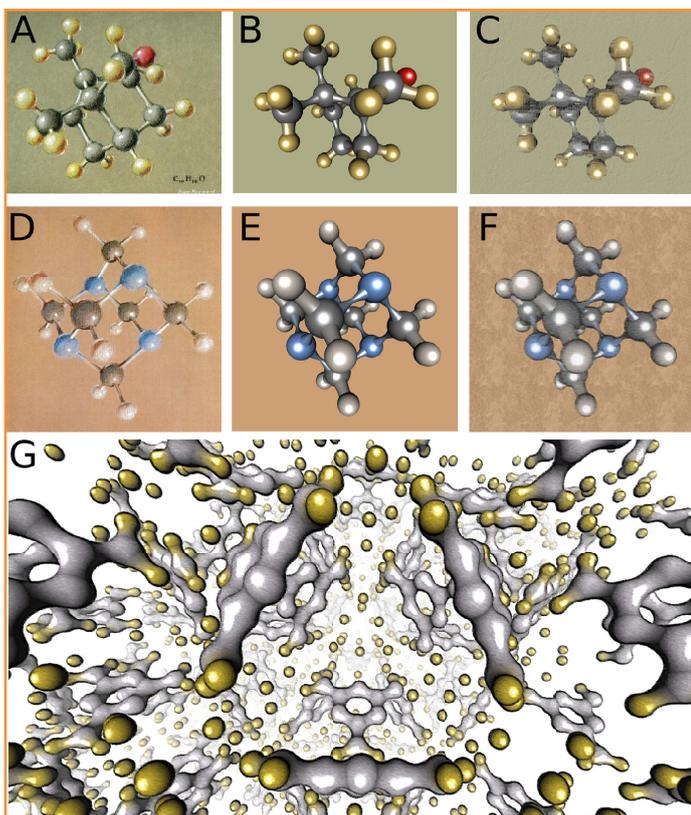


Figure 1 - Les deux premières images en haut à gauche sont des dessins au pastel de Roger Hayward (1964) : la molécule de camphre (image A) et celle d'hexaméthylènetétramine (image D), Courtesy Special Collections & Archives Research Center, Oregon State University Libraries. Ces dessins sont à comparer avec les représentations informatiques disponibles de nos jours (images B et E). Après l'utilisation d'un logiciel de retouche d'image, il est possible d'obtenir des effets assez comparables aux dessins (images C, F et G). Image G : représentation du MIL-96 [20], matériau microporeux développé à l'Institut Lavoisier. Logiciel utilisé : HyperBalls [2, 21].

d'évoluer, ce qui a grandement aidé les chercheurs à mieux comprendre leurs sujets d'étude.

De même, les techniques de visualisation sont passées ces dernières années de méthodes comme la triangulation de surface* à des approches comme le lancer de rayons sur cartes graphiques* qui permet d'avoir un rendu efficace (*i.e.* un affichage rapide d'un grand nombre d'images mesuré en termes d'images par seconde) pour des milliers d'atomes avec une qualité d'image excellente (*i.e.* une très grande résolution en nombre de pixels) [1-2]. Ceci a été permis par l'efficacité accrue des cartes graphiques (poussée par le marché du jeu vidéo) qui peut être exploitée au maximum par des techniques telles que le lancer de rayons. La quantité croissante de logiciels disponibles gratuitement permet à tout le monde d'accéder à ces techniques [3].

Lorsqu'il s'agit de rendre visible l'invisible, l'analogie avec des objets macroscopiques est très utile : différentes techniques d'éclairage permettent de « mettre en lumière » les molécules et leurs formes complexes. Ceci est d'autant plus important que les récentes avancées technologiques ont permis de déterminer les structures de macromolécules de plus en plus grosses, et donc de plus en plus complexes.

Du fait de ces avancées technologiques et scientifiques, les données ne sont plus seulement statiques, mais aussi dynamiques : grâce aux simulations numériques de la modélisation moléculaire, il est possible de produire 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 simplification des données peut passer par le biais de l'abstraction en ne représentant que certains éléments pertinents pour faire, par exemple, la différence entre les mouvements oscillatoires aléatoires et les mécanismes moléculaires importants.

Sur la route d'Hollywood

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 ou de permettre une meilleure interaction avec le modèle [4-5]. Plusieurs équipes de recherche à travers le monde utilisent des logiciels dédiés à la création de films d'animation en 3D pour réaliser, entre autres, des courts-métrages permettant aux non-spécialistes de mieux appréhender des phénomènes biologiques. Un certain nombre de ces films sont d'ailleurs visibles sur Internet [6]. Ce type d'outils peut également être utilisé au sein d'équipes de recherche pour mieux saisir les propriétés des molécules que les chercheurs étudient en les manipulant, ou en les regardant sous différents angles et en testant des hypothèses très simples comme des contraintes de distance, de forme, etc. Ainsi ces outils qui étaient, dans un premier temps, destinés à un tout autre but prennent peu à peu place au sein des laboratoires scientifiques.

Mélanger le réel, le virtuel et l'art : une chance à saisir pour l'enseignement

Les premières illustrations réalisées dans les années 60 montrent comment l'art du dessinateur était mis au service de la science à une époque où il n'était pas possible de réaliser ces figures sur ordinateur (voir les dessins en pastel de Roger Hayward *figure 1*) [7]. De nos jours, les masses de données issues des simulations numériques requièrent des approches artistiques et pédagogiques afin de les rendre compréhensibles, et parfois, entre science et art, il n'y a qu'un petit pas [8]. Les illustrations de systèmes moléculaires font fréquemment la une des journaux spécialisés où le caractère artistique est alors pris en compte. Les formes de ces assemblages moléculaires peuvent être sources 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 (par exemple David S. Goodsell [9] ou Axel Kohlmeyer [10]). De plus, grâce à la réalité augmentée*, les modèles physiques* utilisés depuis des décennies pourraient retrouver une seconde jeunesse en leur ajoutant de petits capteurs permettant de manipuler les avatars* correspondants sur l'écran de l'ordinateur [11]. Ceci ouvre la porte à un nouveau type d'interactivité entre l'étudiant et le logiciel, directement inspiré des dernières avancées réalisées par l'industrie des jeux vidéo. L'évolution de la visualisation scientifique des systèmes moléculaires en chimie et en biologie crée de nouvelles perspectives et l'enseignement peut en bénéficier grandement.

Du laboratoire à l'amphithéâtre

Ces représentations statiques ou dynamiques d'objets chimiques (ou même biochimiques) sont un pont idéal entre la recherche et la pédagogie, donnant l'occasion de mettre en lumière de manière efficace, au-delà des objets eux-mêmes, les modèles physiques qui gouvernent leur comportement. Cette seconde partie montre comment on peut s'appuyer sur des articles scientifiques pour clarifier l'enseignement des réactions chimiques, grâce à une animation 3D accompagnée d'un commentaire pédagogique [12].

Un contenu pédagogique puisant directement dans les résultats de recherche

La notion de réaction chimique est enseignée au lycée dès la classe de seconde et son importance n'est pas à

démontrer. Elle est traditionnellement basée sur une représentation symbolique et 2D dévoilant les changements survenant au cours de la transformation du(des) réactif(s) – essentiellement la formation et la rupture de liaisons chimiques. Mais en chimie, l'appréhension tridimensionnelle des objets est indispensable, notamment l'arrangement spatial des atomes au sein d'un système en cours de réaction. En recherche, l'étude théorique d'un mécanisme réactionnel élémentaire passe par la détermination d'une géométrie caractéristique « clé » de la réaction appelée « état de transition* », souvent fournie en appendice du journal après publication. Cette donnée numérique (disponible sous forme de coordonnées cartésiennes*) recèle de véritables trésors pour l'enseignement, pour peu que l'on fasse l'effort de la valoriser. En effet, partant de cette structure géométrique, il est possible, grâce aux outils de chimie quantique, de reconstituer le chemin réactionnel, c'est-à-dire un ensemble de structures géométriques qui représentent les déplacements successifs des atomes au cours de la réaction, chacune étant associée à une énergie. L'animation visuelle finale consiste à faire défiler les images du système chimique « prises » régulièrement au cours de sa transformation.

Des données numériques au contenu pédagogique, la route est encore longue...

Outre la recherche bibliographique et l'extraction des données numériques initiales depuis un journal scientifique, la fabrication d'une ressource pédagogique ne se limite pas à des calculs de modélisation moléculaire et à la création d'une « image animée ». Comme mentionné plus haut, la scénarisation et l'intégration du contenu pédagogique à un support numérique nécessitent des compétences complémentaires dans les domaines de l'imagerie, de l'infographie, du « design », du web..., réclamant un effort collaboratif entre scientifiques et spécialistes du rendu d'images. Le fruit de ce travail doit être doté d'un environnement convivial, encapsulant les données codifiées de façon simple et complété d'informations comme l'échelle des longueurs, mais offrant aussi une interactivité à l'utilisateur (*figure 2*).

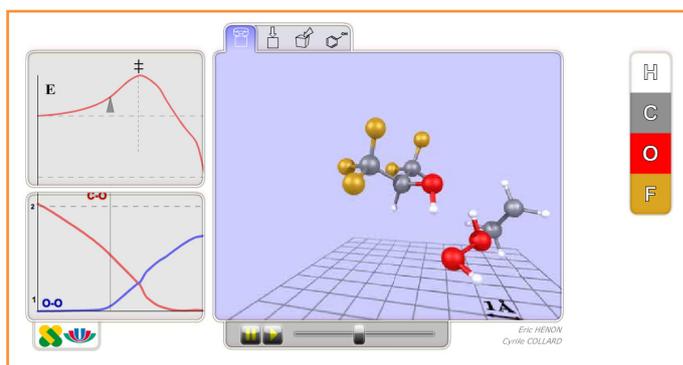


Figure 2 - Cliché extrait d'une banque d'animations de réactions chimiques [12] : époxydation acido catalysée de l'éthène.

Ces ressources numériques ne sont toutefois pas des images de synthèse, mais bel et bien le résultat de calculs reflétant le comportement des molécules au cours d'une réaction, une sorte de « chimie augmentée » pour l'enseignement.

Ainsi, l'accompagnement visuel du schéma 2D de la réaction par sa trajectoire animée 3D apporte une mine d'informations précieuses (impossible à reproduire ici sur papier !) à l'étudiant, offrant un support complémentaire à l'enseignant. Une animation 3D courte et simple permet une compréhension approfondie du processus et une meilleure mémorisation par l'élève, un surcroît d'intérêt de sa part aussi. Dans le cas d'une réaction de type Diels-Alder* par exemple, l'accent pourra être mis sur le mode d'approche des réactifs en relation avec la stéréochimie des produits obtenus. Fort heureusement, les nombreuses réactions chimiques suivent un nombre limité de mécanismes, réduisant ainsi le contenu numérique à quelques « réactions types », le contenu pédagogique devant, lui, être adapté au public d'élèves ou d'étudiants visé. Les journaux scientifiques abondent maintenant en résultats théoriques dans tous les domaines de la chimie et autour de la chimie, permettant potentiellement d'illustrer une multitude de processus (effet de solvant, catalyse, action enzymatique...), preuve, s'il en est, que la complémentarité enseignement/recherche portée par les universitaires n'est pas une vue de l'esprit.

Durant ces dernières années, l'usage des TIC (technologies de l'information et de la communication) dans la pratique enseignante et étudiante s'est fortement structuré. Néanmoins, si la mise à disposition d'une banque numérique d'animations 3D de réactions chimiques [13] est souhaitable pour les étudiants, sa diffusion nécessite un encadrement pédagogique rigoureux.

De la bonne utilisation des ressources numériques et computationnelles en enseignement de chimie

L'intégration de toutes ces représentations, scénarisations et ressources numériques au sein des unités d'enseignement à dominante chimie ou biochimie devient alors naturelle dans le cadre de nouvelles démarches pédagogiques [14]. Elles permettent une mise en perspective des concepts théoriques parfois arides, et comme elles s'appuient sur des fondements scientifiques démontrés et validés, attestent auprès des étudiants de l'intérêt à plus ou moins long terme de leur apprentissage. Savamment dosées et pertinemment placées, l'effet « cinéma » est minoré et l'impact pédagogique s'en retrouve renforcé. Comme il est intéressant de montrer, en première année des sciences de la vie, la structure et le comportement dynamique d'une enzyme, il l'est tout autant, au cours d'une séance de chimie organique, de visualiser le profil énergétique d'une réaction chimique de long d'une coordonnée réactionnelle.

Réponse pragmatique aux deux exigences pédagogiques : i) intéresser et impliquer l'étudiant et ii) le mener à la réussite, la chimie computationnelle* sous toutes ses formes a aussi pour vertu de susciter sa curiosité. Une fois le processus enclenché, il est étonnant de voir le degré d'implication des étudiants dans cet exercice de style et de noter avec plaisir leur envie de réussir, comme en attestent leurs comptes-rendus.

Durant les deux ou trois premières années universitaires, tant que les cours fondamentaux ne sont pas suffisamment développés pour expliquer tous les concepts de ces programmes de calculs, la chimie computationnelle peut alors être considérée comme un outil pour l'enseignement de la chimie, au même titre que les appareillages complexes

mis à la disposition des étudiants durant les séances de travaux pratiques (pHmètre, conductimètre, spectromètres UV-visible ou IR, densimètres numériques...). La tendance s'inverse généralement au moment de l'entrée en master. L'appropriation par les étudiants des concepts fondamentaux finit de « désacraliser » les programmes utilisés dont ils deviennent en quelque sorte des utilisateurs avisés.

Si la théorie n'est pas totalement maîtrisée au cours des première et deuxième années universitaires, l'utilisation de cet outil permet, autour de l'analyse des résultats obtenus, un échange constructif menant à un renforcement de la culture « chimique » et de la culture scientifique en général. Ainsi, en proposant dès la première année universitaire d'optimiser une structure géométrique pour vérifier la méthode VSEPR*, des discussions peuvent s'engager sur la définition d'une surface d'énergie potentielle, sur l'existence de charges partielles et sur des notions de réactivité [15-16]. À un autre niveau, la création par les étudiants d'un programme de champs de forces permet l'appropriation de concepts tels que les énergies d'interactions, le calcul de propriétés électrostatiques, la visualisation de moments dipolaires.

La progression des étudiants dans l'acquisition de la théorie est alors facilitée du fait de ces discussions (voir *tableau* ci-dessous). Il n'est alors pas rare que l'étudiant, réalisant que l'outil computationnel peut lui apporter plus que les travaux effectués durant les séances sur ordinateurs, n'hésite pas à demander à l'enseignant comment il serait possible d'obtenir plus de propriétés analysables. Les étudiants repoussent ainsi d'eux-mêmes les limites des programmes pédagogiques qui leur sont imposés.

Ressenti des étudiants de 3^e année de licence de chimie (Université de Nice) à l'issue des séances de chimie computationnelle.

La prise en main des logiciels utilisés est considérée comme facile (53 %) ou gérable (47 %).

Estimez-vous que les TD de chimie computationnelle

- apportent une aide significative à la compréhension des concepts	18,4 %
- apportent une aide à la compréhension de certains concepts	72,4 %
- apportent une aide limitée à un ou deux concepts	9,2 %
- n'apportent pas de contribution/rendent les concepts plus obscurs	0 %

Les concepts abordés vous paraissent-ils

- plus clairs qu'après les seuls TD classiques	71,2 %
- pas plus, pas moins clairs	28,8 %
- moins clairs qu'après les seuls TD classiques	0 %

Conclusion

Les images ont un pouvoir sans égal pour faire naître des représentations mentales, supports irremplaçables de la pensée. Le modèle moléculaire matériel en bois de von Hofmann [17] inspiré du jeu de croquet et représentant pour la première fois en 1865, non pas l'arrangement spatial moléculaire mais plutôt l'enchaînement des atomes dans la molécule, constitue un exemple frappant de nouveau support grâce auquel la génération suivante de chimistes a pensé et travaillé en 3D. Ce nouveau langage visuel donnant une image mentale 3D des structures chimiques est aujourd'hui encore utilisé (modèle « boules et bâtons ») et a

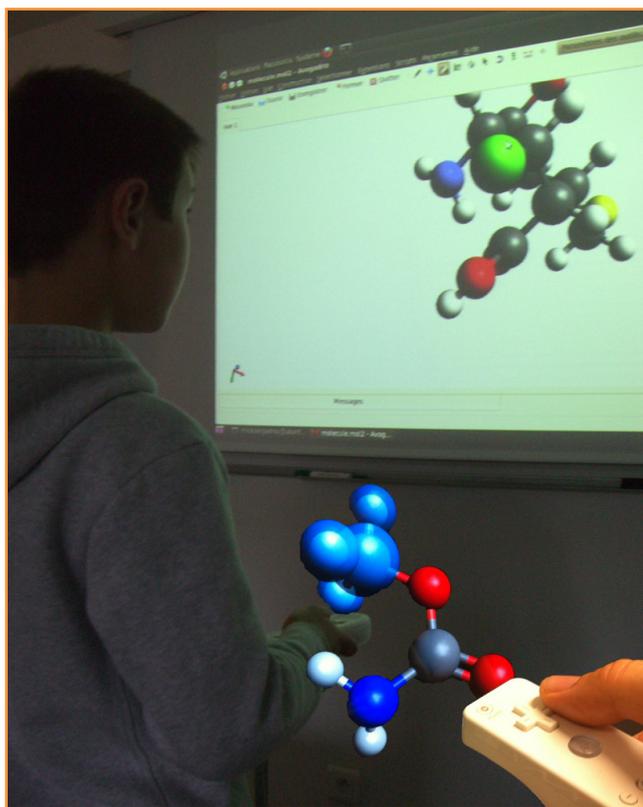


Figure 3 - Utilisation de la manette de jeu « Wiimote » couplée à un logiciel d'édition et visualisation de structures chimiques (projet WiiChem [18]).

de plus permis de renforcer le lien entre l'expert et le public. Aujourd'hui, la démocratisation des techniques de visualisation 3D ouvre grand la porte à la réalité virtuelle pour l'enseignement en chimie. Ces approches permettent une démarche pédagogique plus complète, plus moderne et plus motivante pour apprendre et enseigner. Il reste que ces nouvelles ressources doivent toutefois être utilisées lors de séances très encadrées pour que la « boîte noire » puisse dévoiler le maximum de ses « secrets ». Si la représentation 3D d'objets virtuels a bénéficié de progrès récents (lunettes actives 3D, écrans 3D...), la manipulation 3D par l'action directe de l'utilisateur est encore très limitée en raison du nombre restreint de périphériques 3D génériques. Cependant, l'apparition de dispositifs modernes comme la « Wiimote » ou la « Kinect » laisse envisager de nouveaux modes immersifs de création et manipulation par ordinateur de modèles moléculaires (figure 3) et, pourquoi pas, dotés d'interaction avec la simulation elle-même [18-19]. Dans ces nouvelles approches, éventuellement complétées par un dispositif haptique*, la souris est abandonnée, le rôle de la main redevient central : un retour aux sources du modèle moléculaire proposé par von Hofmann en 1865...

Marc Baaden et Matthieu Chavent remercient l'ANR pour son soutien dans le cadre des projets FvNano (ANR-07-CIS7-003) et ExaViz (ANR-11-MONU-003) ainsi que les équipes de ces projets. La Région Champagne-Ardenne est ici remerciée pour l'aide financière apportée aux projets pédagogiques en chimie : 3DChem et WiiChem. Éric Hénon est particulièrement reconnaissant envers ses collaborateurs Cyrille Collard, Mickaël Gadroy et Michaël Krajecki pour leur aide et implication dans ces projets. Serge Antonczak tient à remercier ses collègues Jérôme Golebiowski et Sébastien Fiorucci sans lesquels cette progression pédagogique à l'aide de calculs et de programmation n'aurait pu se faire.

Références

- [1] Chavent M., Lévy B., Krone M., Bidmon K., Nominé J.-P., Ertl T., Baaden M., GPU-powered tools boost molecular visualization, *Brief. Bioinform.*, **2011**, *12*(6), p. 689.
- [2] Chavent M., Vanel A., Tek A., Lévy B., Robert S., Raffin B., Baaden M., GPU-accelerated atom and dynamic bond visualization using HyperBalls, a unified algorithm for balls, sticks and hyperboloids, *J. Comput. Chem.*, **2011**, *32*, p. 2924.
- [3] www.baaden.ibpc.fr/projects/fvnano/gputools
- [4] McGill G., Molecular movies... coming to a lecture near you, *Cell*, **2008**, *133*(7), p. 1127.
- [5] Isawa J., Animating the model figure, *Trends in Cell Biology*, **2010**, *20*(12), p. 699.
- [6] www.molecularmovies.com (rubrique « Showcase »).
- [7] Perkins J., Illustrating atoms and molecules, *2011 Journal of Natural Science Illustration* (www.gnsi.org/journal/illustrating-atoms-and-molecules).
- [8] Goodsell D., *La machinerie de la vie*, EDP Sciences, **2010**.
- [9] <http://mg1.scripps.edu/people/goodsell>
- [10] <http://sites.google.com/site/akohlmeiy/news-and-announcements/sciencevsart>
- [11] Gillet A., Sanner M., Stoffer D., Olson A., Tangible interfaces for structural molecular biology, *Structure*, **2005**, *13*(3), p. 483.
- [12] Collard C., Hénon E., www.univ-reims.fr/3DChem, www.unisciel.fr
- [13] Chouchan D., La modélisation moléculaire là où on ne l'attend pas, *La Recherche*, **2009**, *432*, p. 22.
- [14] Venkataraman B., Visualization and interactivity in the teaching of chemistry to science and non-science students, *Chem. Educ. Res. Pract.*, **2009**, *10*, p. 62.
- [15] Linenberger K.J., Cole R.S., Sarkar S., Looking beyond Lewis structures: a general chemistry molecular modeling experiment focusing on physical properties and geometry, *J. Chem. Educ.*, **2011**, *88*(7), p. 962.
- [16] McNaught I.J., Testing and extending VSEPR with WebMO and MOPAC or GAMESS, *J. Chem. Educ.*, **2011**, *88*, p. 421.
- [17] von Hofmann A.W., On the combining power of atoms, *Proceedings of the Royal Institution of Great Britain*, **1865**, *4*, p. 401.
- [18] Gadroy M., Hénon E., Chemistry with Wiimote, www.univ-reims.fr/WiiChem
- [19] Delalande O., Férey N., Grasseau G., Baaden M., Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations, *J. Comput. Chem.*, **2009**, *30*, p. 2375.
- [20] Volkringer C., Loiseau T., Férey G., Morais C.M., Taulelle F., Montouillout V., Massiot D., Synthesis, crystal structure and ^{71}Ga solid state NMR of a MOF-type gallium trimesate (MIL-96) with μ_3 -oxo bridged trinuclear units and a hexagonal 18-ring network, *Microporous and Mesoporous Materials*, **2007**, *105*(1-2), p. 111.
- [21] <http://hyperballs.sourceforge.net> (rubrique « Software – Downloads »).



M. Chavent

M. Baaden

E. Hénon

S. Antonczak

Matthieu Chavent

est chercheur associé à l'Université d'Oxford (Department of Biochemistry)¹.

Marc Baaden (auteur correspondant)

est chargé de recherche au CNRS à l'Institut de Biologie Physico-Chimique, Université Paris Diderot².

Éric Hénon

est professeur à l'Université de Reims Champagne-Ardenne³.

Serge Antonczak

est professeur à l'Université de Nice-Sophia Antipolis⁴.

¹ Structural Bioinformatics and Computational Biochemistry, Department of Biochemistry, University of Oxford, South Parks Road, Oxford OX1 3QU (Royaume-Uni).
Courriel : matthieu.chavent@bioch.ox.ac.uk

² Institut de Biologie Physico-Chimique, Laboratoire de Biochimie Théorique, UPR CNRS 9080, Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 13 rue Pierre et Marie Curie, F-75005 Paris.
Courriel : baaden@smplinux.de

³ Institut de Chimie Moléculaire de Reims, Équipe « Biomolécules : synthèse et mécanismes d'action », UMR CNRS 7312, Université de Reims Champagne-Ardenne, Moulin de la Housse, F-51687 Reims Cedex 2.
Courriel : eric.henon@univ-reims.fr

⁴ Institut de Chimie de Nice, Équipe « Modélisation et reconnaissance moléculaire », UMR CNRS 7272, Faculté des Sciences, Université de Nice-Sophia Antipolis, F-06108 Nice Cedex 2.
Courriel : Serge.Antonczak@unice.fr