

Du spectre à la structure : visualisation interactive et immersive d'édifices moléculaires, des petits agrégats aux assemblages complexes

Marc Baaden^{1*}

¹ Université Paris Cité, CNRS, Laboratoire de Biochimie Théorique, 13 rue Pierre et Marie Curie, F-75005, Paris, France

Comprendre les édifices moléculaires — qu'ils soient isolés en phase gazeuse, piégés dans une matrice, ou intégrés à un environnement complexe — passe de plus en plus par une articulation fine entre simulation, expérience et analyse visuelle. Cet exposé présentera comment les outils interactifs et immersifs permettent d'explorer des systèmes moléculaires couvrant plusieurs ordres de grandeur en taille et en complexité: agrégats, nano-objets, biomolécules solvatées, assemblages supramoléculaires. Au-delà de la visualisation, ces approches ouvrent la voie à des manipulations interactives, à la confrontation directe entre données calculées et mesurées, et au partage FAIR des expériences moléculaires. Je discuterai des cas d'usage que j'espère pertinents pour la communauté EMIE — depuis l'interprétation de signatures spectroscopiques jusqu'à l'analyse des effets d'environnement — et des perspectives qu'offrent les jumeaux numériques moléculaires pour la physico-chimie de demain. J'illustrerai mes propos par des expériences développées autour de la plateforme UnityMol et d'outils comme bioSPRING et MolPlay qui sont disponible gratuitement.



Figure 1 : Illustration conceptuelle d'une manipulation interactive et immersive.

[1] <https://unity.mol3d.tech>

[2] <https://molplay.mol3d.tech>

[3] <https://biospring.mol3d.tech>

* correspondant : baaden@smplinux.de