

Les molécules en fichier 3D

Pour illustrer un cours, pour de la réalité virtuelle, pour de l'impression 3D, pour de l'animation, il est souvent utile de proposer numériquement des molécules en 3 dimensions, autrement dit avoir le fichier qui stocke les informations de la molécule en 3D.

Loin d'être difficile à réaliser, il suffit de quelques outils pour avoir ces molécules en 3 dimensions.

Ce tutoriel est également disponible en vidéo :

<https://youtu.be/PptySykXmAY>

La méthode

Avant d'attaquer à proprement dit le tutoriel, un bref descriptif de la méthode et avant de la raison d'être du tutoriel.

De nombreux formats de fichiers utilisés dans le monde de la chimie permet d'afficher les molécules en 3D, il existe d'ailleurs des interfaces de visualisation de molécules en 3D ; les logiciels de modélisation de molécules sont généralement tous capables pour d'afficher les molécules en 3D. Cependant afficher la molécule en 3D c'est bien, le mieux serait d'avoir la molécule dans un fichier 3D pour l'utiliser dans des nombreuses applications comme par exemple dans un système de réalité virtuelle ou pour de l'impression en 3D.

Pour obtenir une molécule dans un fichier 3D il donc falloir quelques étapes :

1. Un fichier qui modélise la molécule.
2. Un fichier qui modélise la molécule exploitable par un logiciel de modélisation 3D
3. Un fichier contenant le modèle 3D de la molécule.

Pour ces trois étapes, on va utiliser des ressources libres, soit logiciels, soit site Internet.

Deux logiciels à télécharger et à installer au préalable.

Pour obtenir numériquement les molécules en 3 dimensions, il est nécessaire d'avoir deux logiciels (libres et gratuits) :

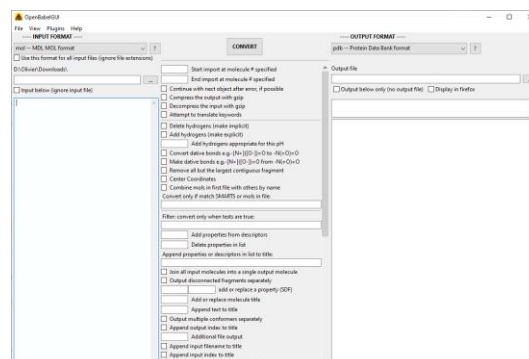
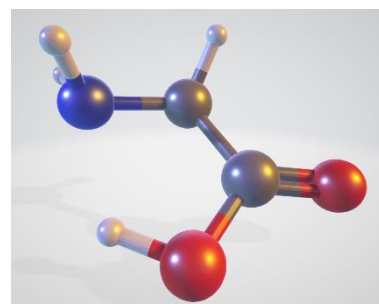
Openbabel

Site du logiciel : http://openbabel.org/wiki/Main_Page

Plateforme disponible : Windows, MacOS, Linux.

Taille du logiciel à télécharger : ± 35 Mo

Rôle : Openbabel est un logiciel qui permet de convertir le format de fichiers d'une molécule vers un autre format de fichiers. C'est ainsi que ce logiciel va être utilisé dans le cadre de ce tutoriel.



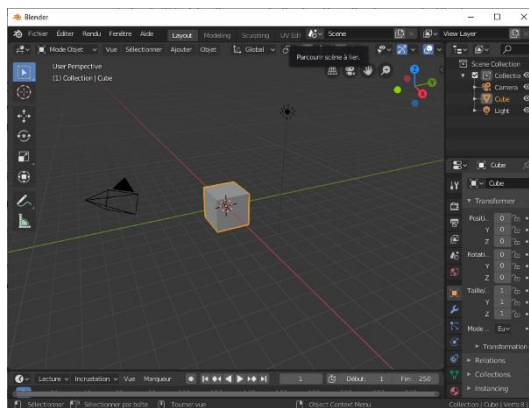
Blender

Site du logiciel : <https://www.blender.org/>

Plateformes disponibles : Windows, MacOS, Linux.

Taille du logiciel à télécharger : ± 85 Mo

Rôle : Blender est un logiciel de modélisation 3D, d'animation, de simulation, de montage vidéo. Parmi les nombreuses fonctionnalités offertes, ce tutoriel ne va utiliser qu'une infime fraction de ce logiciel : la modélisation 3D de la molécule. Aucune connaissance en modélisation 3D n'est donc demandée !



Lorsque ces deux logiciels sont installés, vous êtes prêts pour vous lancer !

Le tutoriel !

La molécule à modéliser est la glycine : $C_2H_5NO_2$

Récupérer une fichier .mol

Etape 1. Se connecter au site www.chemspider.com

A screenshot of the ChemSpider website. The page features a search bar with the text 'Search ChemSpider' and a magnifying glass icon. Below the search bar, there is a section titled 'Search ChemSpider' with a sub-header 'Matches any text strings used to describe a molecule.' and a search input field. A yellow box highlights the search input field and the magnifying glass icon. Below the search bar, there is a section titled 'What is ChemSpider?' and a section titled 'Search by chemical names' with a list of search criteria: Systematic names, Synonyms, Trade names, and Database identifiers. The website header includes the ChemSpider logo and the Royal Society of Chemistry logo.

On utilise la barre de recherche pour trouver la molécule (dans notre cas, la glycine)

Etape 2. Rechercher la glycine dans le moteur de recherche du site

ChemSpider | Search and share c x +

Non sécurisé | chemspider.com

Applications Bookmarks Accueil - Questions... Online Tone Genera... la Fiche Famille/Co... Grow Purple Single... YouTube Autres favoris

Home About us Web APIs Help Sign in

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

ChemSpider
Search and share chemistry

Search ChemSpider

Help us to improve ChemSpider. Sign up to [join our user research panel](#).

Simple Structure Advanced History

Search ChemSpider

Matches any text strings used to describe a molecule.

glycine|

glycine anion
Glycine
Glycine - 2-morpholinone (1:1)
Glycine - butane (1:2)

ChemSpider is a free chemical structure database providing fast text and structure search access to over 67 million structures from hundreds of data sources.

- Systematic names
- Synonyms
- Trade names
- Database identifiers

Le site propose des choix en fonction de ce qui est tapé dans la barre de recherche principale. Le nom est à écrire en anglais : acetic acid, ethylacetate, ...

Il est également possible de faire une recherche dans la barre de recherche en haut, mais sans que le site propose des choix.

Etape 3. Récupérer le fichier .mol correspondant

Found 1 result
Search term: **glycine** (Found by approved synonym)

Glycine

Molecular Formula	C ₂ H ₅ NO ₂
Average mass	75.067 Da
Monoisotopic mass	75.032028 Da
ChemSpider ID	730

COMMENT ON THIS RECORD

Featured data source
The Merck Index Online has more data on this compound

3D

More details:

Le site a renvoyé une réponse, on récupère alors le fichier .mol qui correspond à cette molécule en cliquant sur l'icône

Selon le navigateur, soit le fichier est automatiquement téléchargé dans le répertoire des téléchargements, soit le navigateur demande ce qu'il doit faire avec ce fichier. Dans ce cas il faut enregistrer le fichier.

Glycine

Molecular Formula	C ₂ H ₅ NO ₂
Average mass	75.067 Da
Monoisotopic mass	75.032028 Da
ChemSpider ID	730

Featured data source
The Merck Index Online has more data on this compound

3D

730.mol

Tout afficher

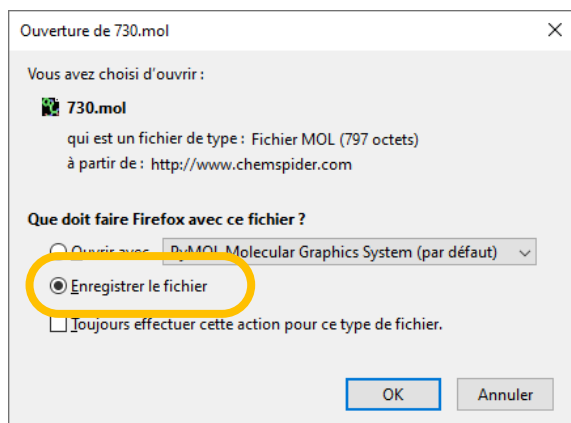
Chrome enregistre directement le fichier. En cliquant sur « ^ » on peut accéder au dossier d'enregistrement du fichier.

Que voulez-vous faire avec 730.mol (797 octets)?
Provenance : chemspider.com

Ouvrir Enregistrer ^ Annuler

Edge demande que faire avec ce fichier, choisir « Enregistrer » (ou cliquer sur « ^ » pour avoir accès à « Enregistrer sous » pour choisir le répertoire de destination du fichier.)

Les molécules en fichier 3D



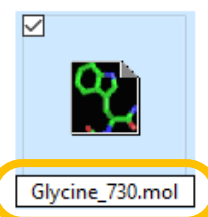
Firefox demande ce qu'il doit faire avec le fichier, il faut sélectionner :

☉ Enregistrer le fichier

Le nom du fichier est constitué d'un nombre qui correspond à l'identifiant de la molécule dans la base de données de Chemspider (ChemSpider Id) comme on peut le voir sur l'écran précédent.

Etape 4. Renommer le fichier

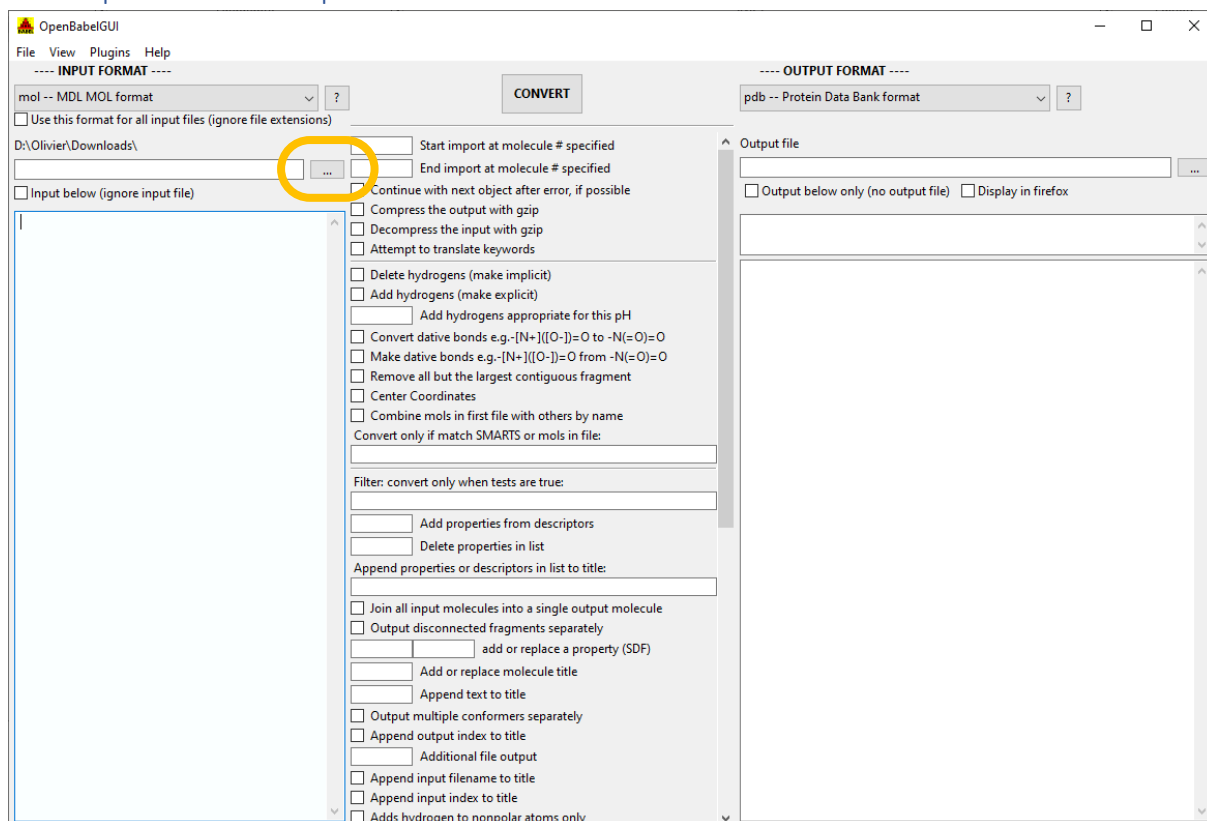
Cette étape est optionnelle mais il peut être intéressant de renommer le fichier pour savoir à quelle molécule il correspond. Cette étape se fait via le gestionnaire de fichier de votre ordinateur. Il est possible de laisser le numéro en le faisant précéder du nom de la molécule.




Convertir le fichier .mol en fichier .pdb

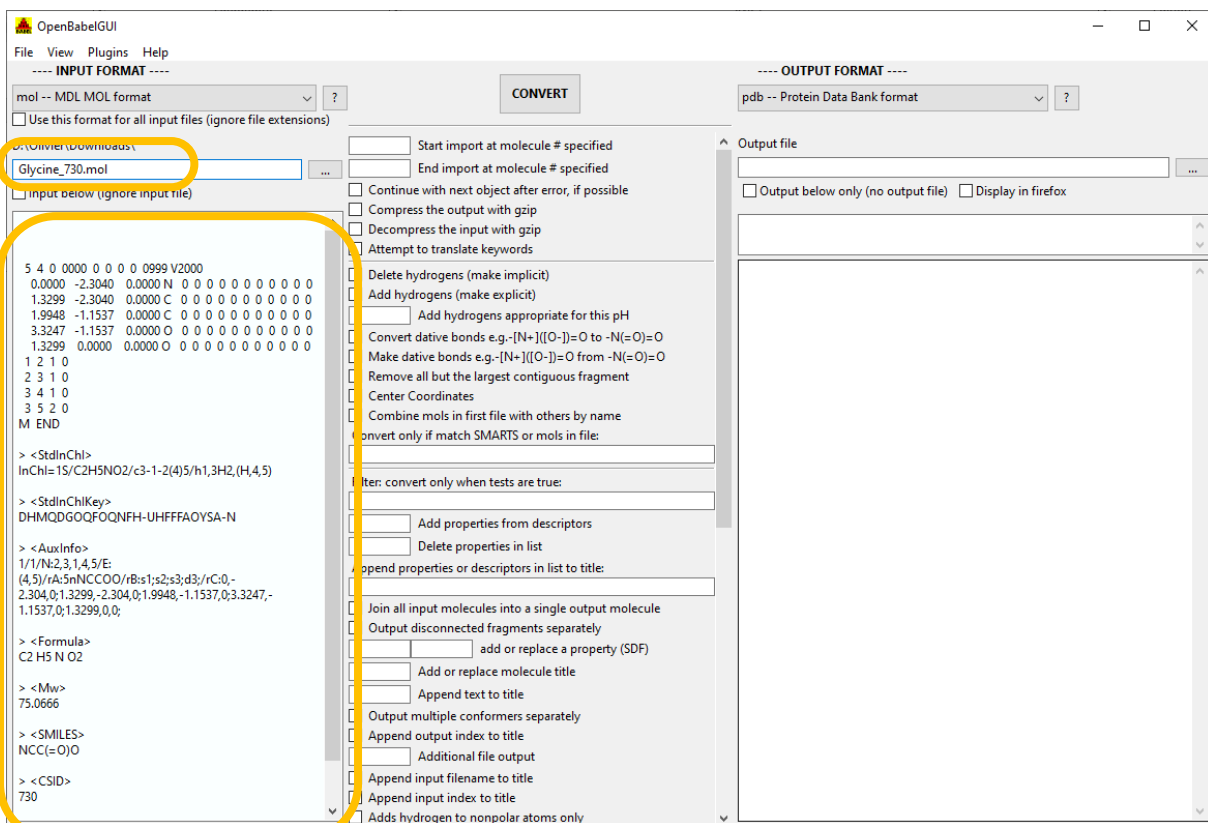
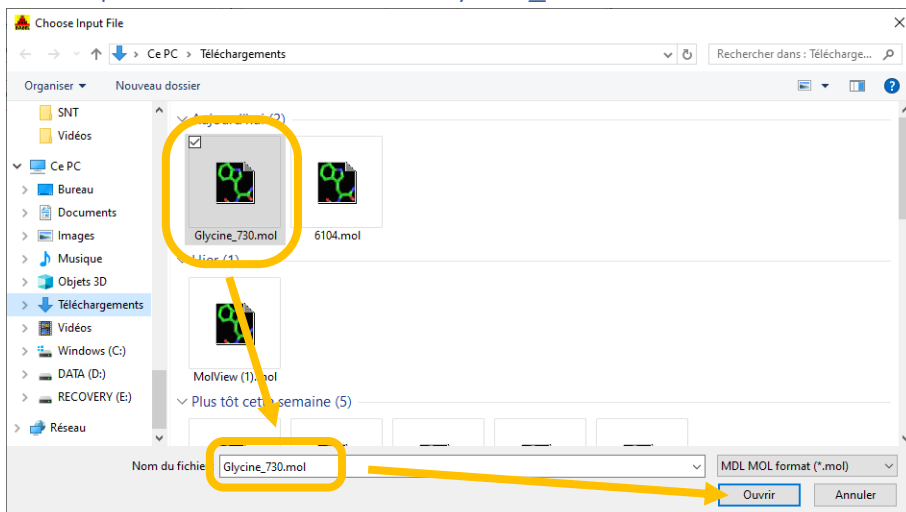
OpenBabel va permettre de convertir le fichier .mol en fichier .pdb car seul ce dernier est exploitable par Blender.

Etape 5. Lancer Openbabel GUI



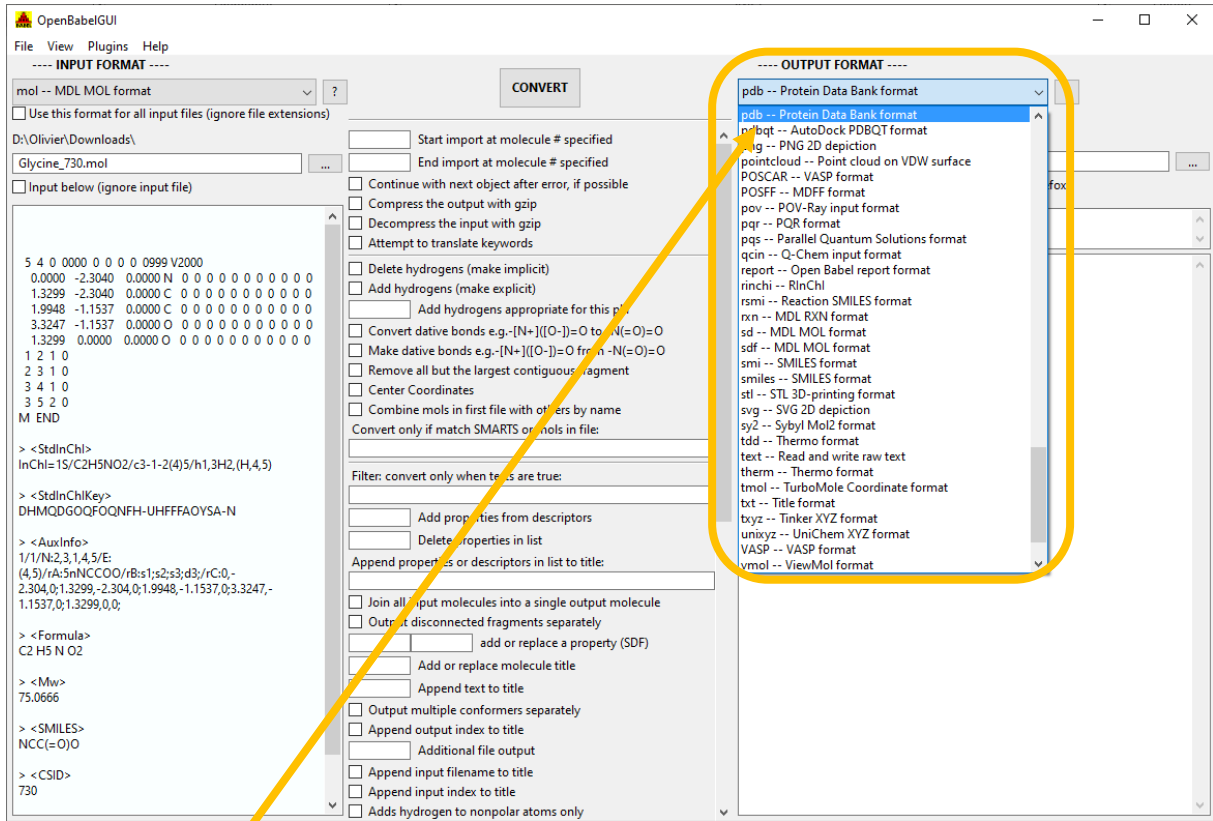
Il faut charger le fichier .mol qui nous intéresse. Pour cela, on s'intéresse à la partie Input Format et particulièrement l'icône  qui permet de choisir le fichier, il suffit de cliquer dessus.

Etape 6. Choisir le fichier Glycine_730.mol



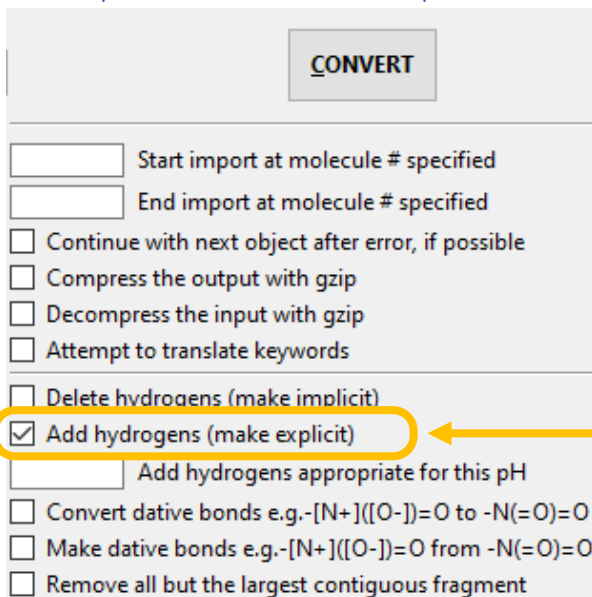
Le fichier a bien été chargé et il est possible de visualiser les informations qu'il contient.

Etape 7. Sélection du format de fichier .pdb (Protein Data Bank)



Dans la partie OUTPUT FORMAT, à droite, il faut utiliser le menu déroulant pour trouver le format de fichier pdb parmi la centaine disponible. Heureusement, les formats sont classés par ordre alphabétique.

Etape 8. Activation de l'option « Add hydrogens (make explicit) »



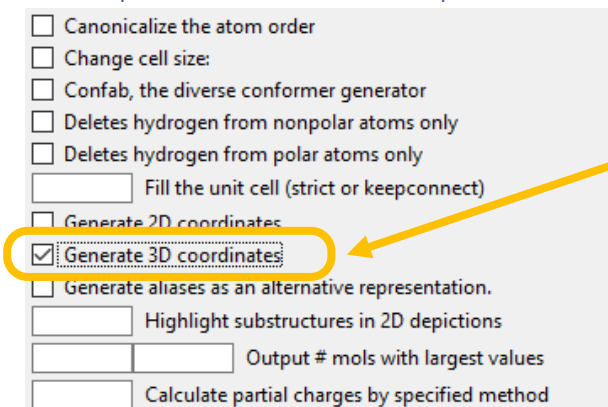
Pour que la molécule soit bien modélisée en 3D, il faut que tous les atomes soient bien présents. Les logiciels de modélisations moléculaires sont prévus pour ajouter automatiquement dans une molécule les atomes d'hydrogène.

Le logiciel de modélisation 3D n'est pas un logiciel de modélisation moléculaire, il faut donc qu'il puisse avoir tous les atomes présents.

C'est ce qu'on réalise en cochant la case « Add hydrogens (make explicit) ».

Il faut vérifier à chaque fois cette case et la cocher si nécessaire.

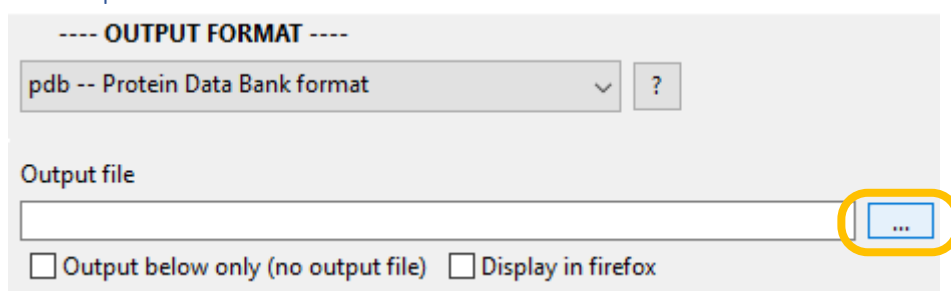
Etape 9. Activation de l'option « Generate 3D coordinates »




Le logiciel de modélisation 3D a besoin d'avoir des coordonnées spatiales des différents atomes.

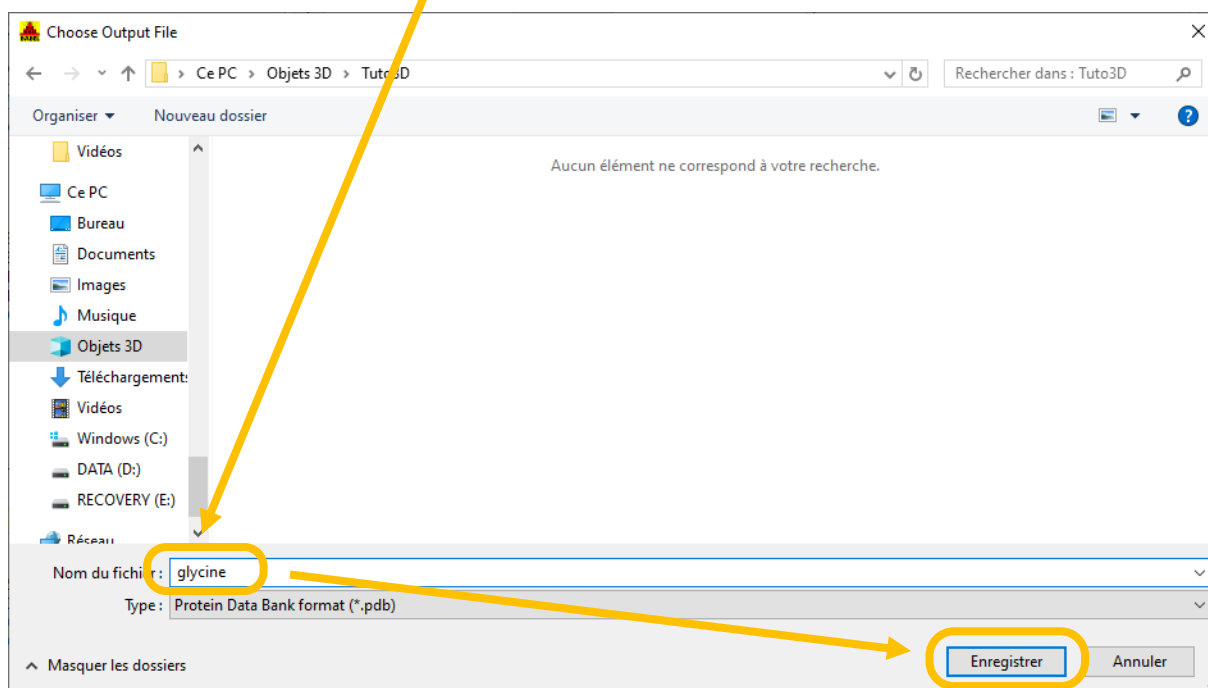
En cochant l'option « Generate 3D coordinates », OpenBabel va calculer des coordonnées 3D pour chacun des atomes.

Etape 10. Choix du fichier de sortie



Il reste à nommer le fichier de sortie et son répertoire de destination. Tout simplement en cliquant sur l'icône  (même icône que pour charger le fichier d'entrée).

Il est possible d'utiliser le même nom de molécule puisque l'extension du fichier sera différente. Cliquer sur enregistrer n'enregistre pas encore le fichier.

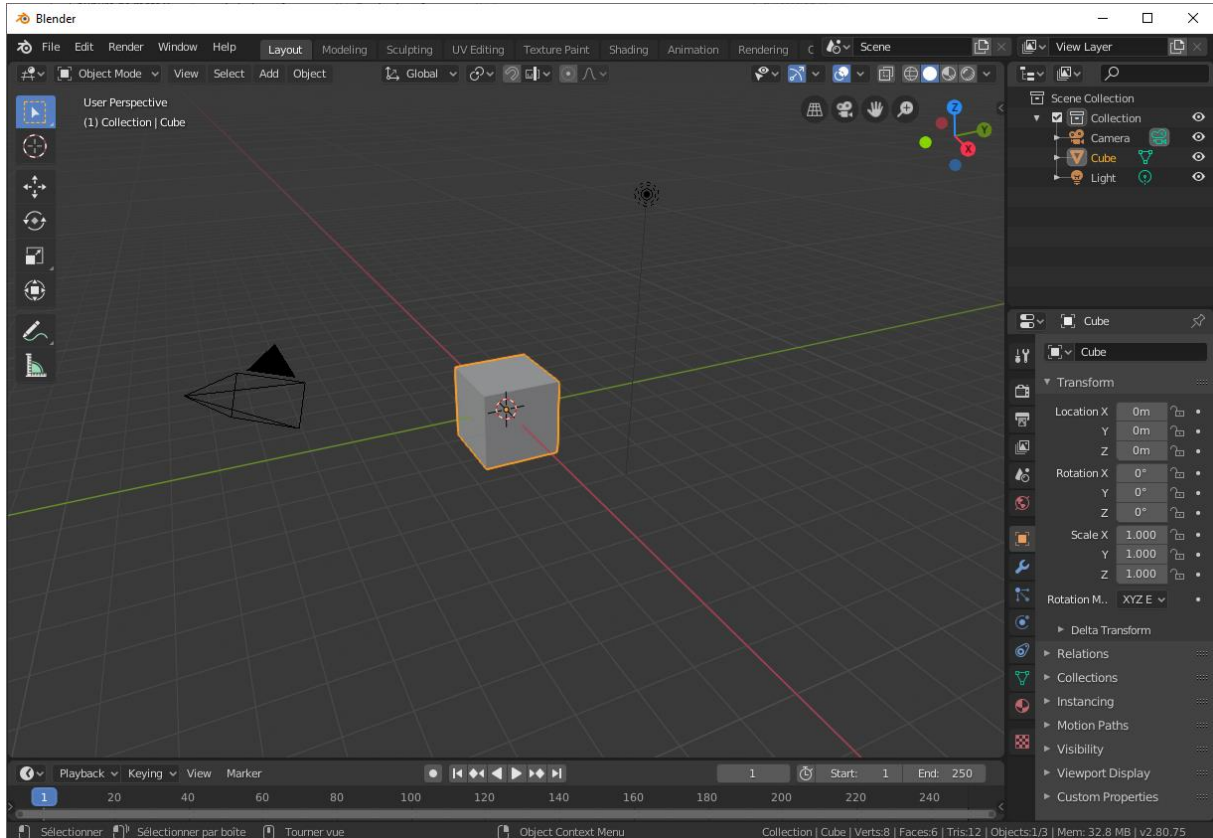


Il ne reste plus qu'à créer le fichier 3D avec Blender.

Créer le fichier 3D de la molécule avec Blender

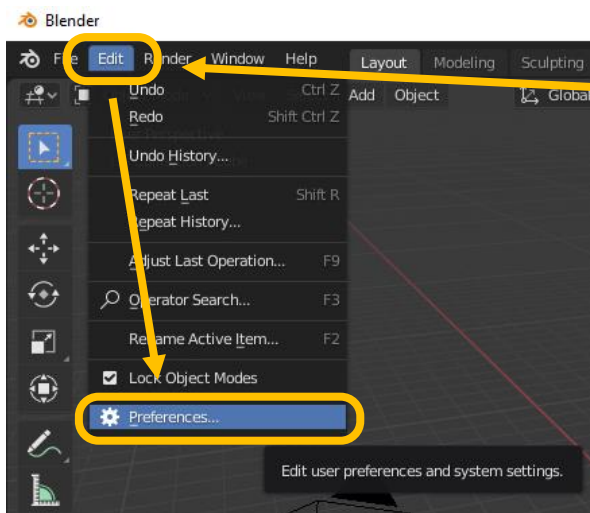
Blender est le logiciel qui va permettre de créer le fichier 3D, c'est-à-dire le fichier qui contient l'objet, dans ce tuto la molécule de glycine, en 3D.

Etape 11. Configurer Blender pour lire les fichiers .pdb



Voici l'interface de Blender quand on lance le logiciel pour la première fois.

La première fois que vous utilisez Blender, il faut passer par une courte étape de configuration pour que le logiciel puisse importer un fichier .pdb. Cette étape n'est à faire que la première fois.



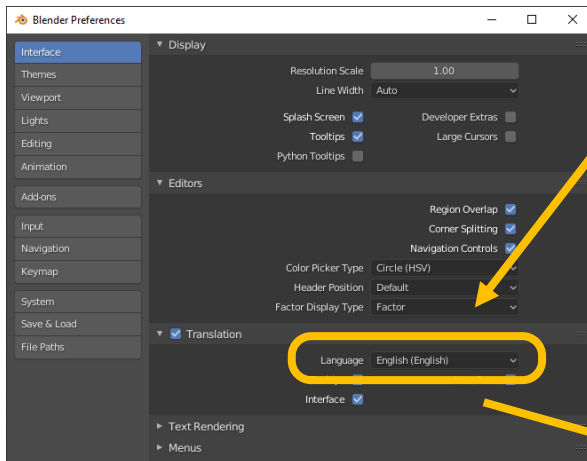
Pour l'étape de configuration de Blender :

Il faut cliquer sur le menu « Edit » (ou « Editer » si le logiciel est déjà configuré en français)

Ensuite, il faut choisir « Preferences... »

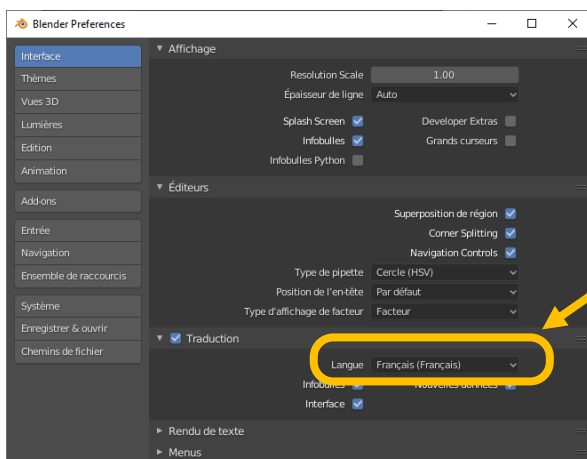
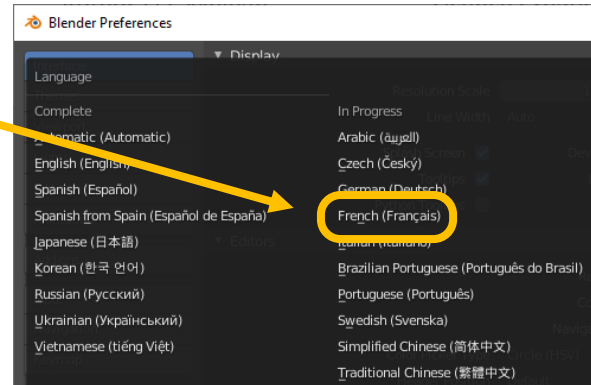
Une nouvelle fenêtre s'ouvre alors...

Les molécules en fichier 3D

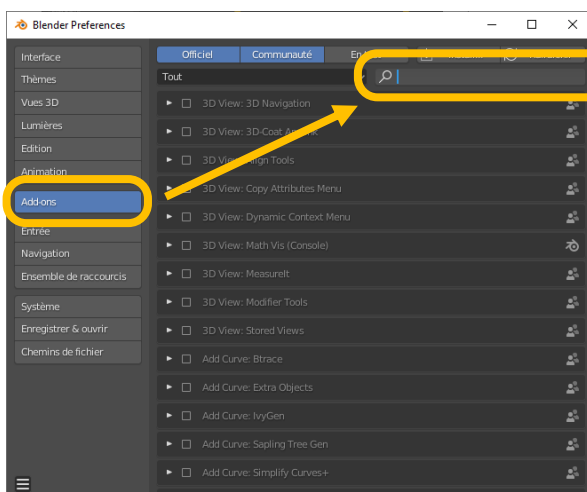


Commençons tout de suite par mettre l'interface en français et pour cela, il faut cliquer sur le menu déroulant « Language ».

Dans la fenêtre qui s'ouvre alors il faut choisir « français ». La traduction est dans la partie « In progress » car tout n'est pas encore traduit en français.



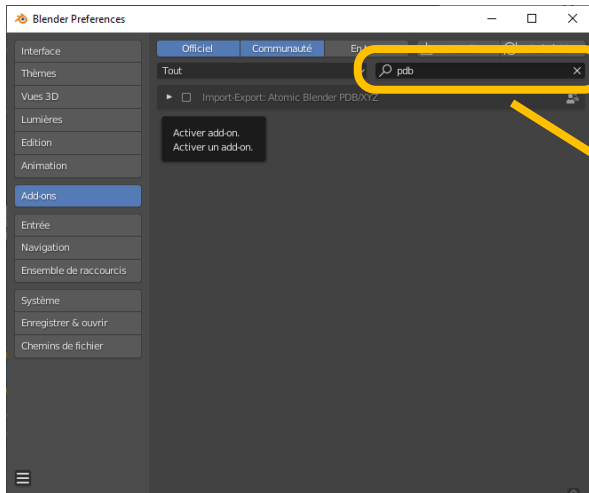
Le changement de langue est immédiat. L'interface est maintenant en français.



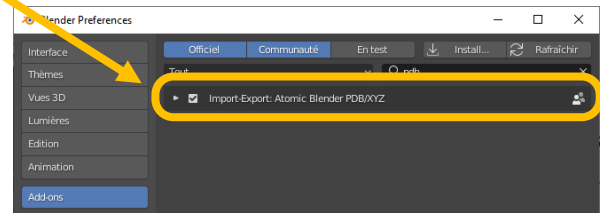
Deuxième étape de configuration : permettre à Blender d'importer le fichier .pdb.

Pour cela, cliquer sur « Add-ons » puis dans la barre de recherche chercher « pdb ».

Les molécules en fichier 3D



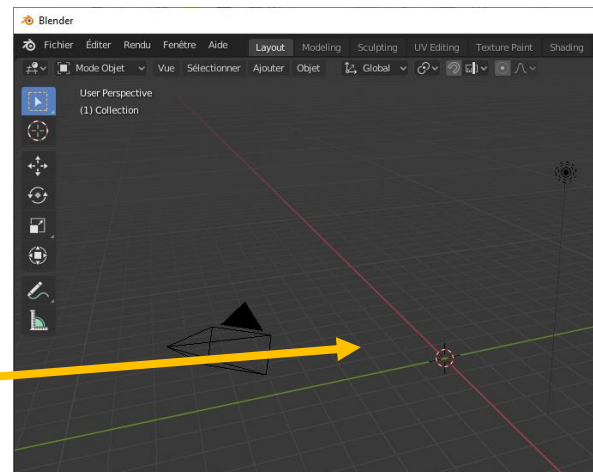
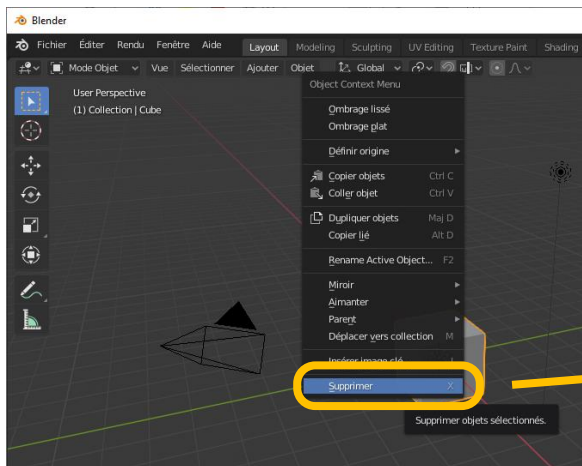
Dès qu'on tape pdb et sans avoir besoin d'appuyer sur la touche « entrée », Blender affiche l'Add-ons qui correspond, il suffit alors de cliquer pour activer l'Add-ons.



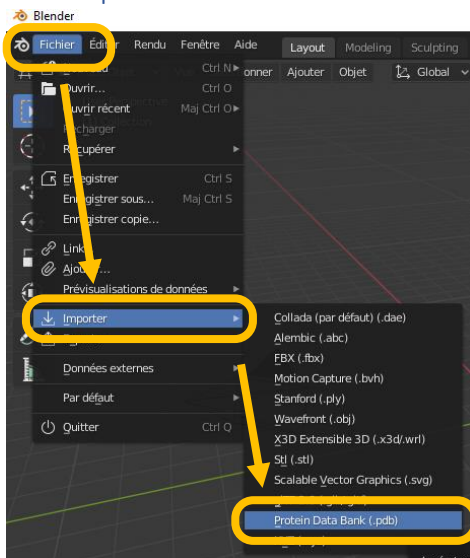
Blender est configuré pour nos besoins, il faut fermer la fenêtre de réglages des préférences.

Etape 12. Effacer le cube

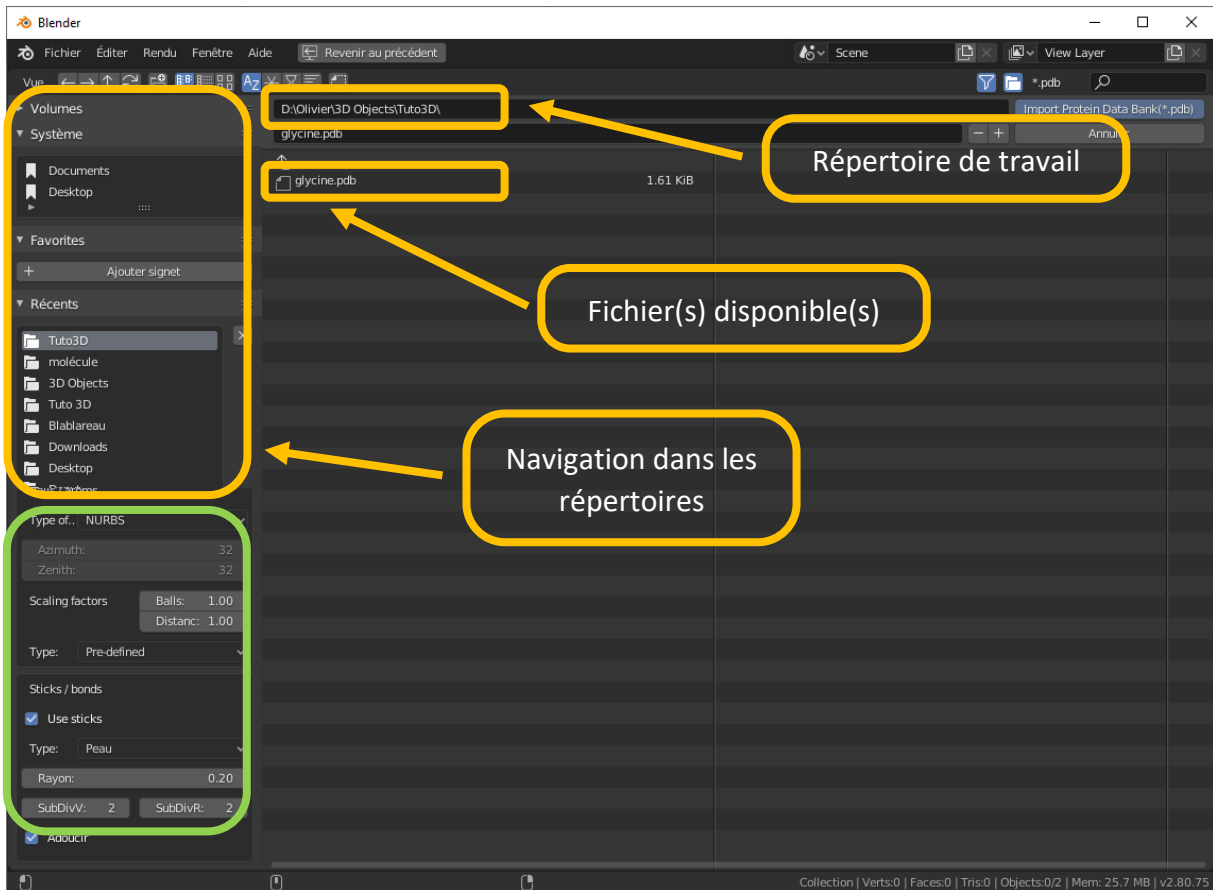
Au lancement de Blender, il y a toujours un cube par défaut. Il faut le supprimer. Très simplement en cliquant dessus et en appuyant sur la touche « suppr » ou sur la touche « X » ou encore avec le bouton droit de la souris et sélectionner « Supprimer ».



Etape 13. Aller dans le menu d'import le fichier .pdb



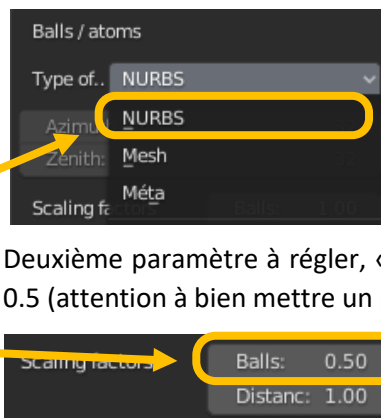
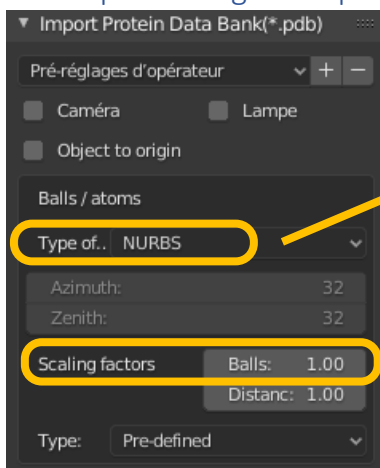
Pour importer il faut aller dans le menu « Fichier » puis « importer » et choisir le format « Protein Data Bank ».



L'interface d'importation permet de naviguer dans les répertoires pour trouver le répertoire de travail, c'est-à-dire celui où se trouve les fichiers au format .pdb qu'on peut utiliser.

Mais avant d'importer, il faut bien régler les paramètres d'importation

Etape 14. Régler les paramètres d'importation

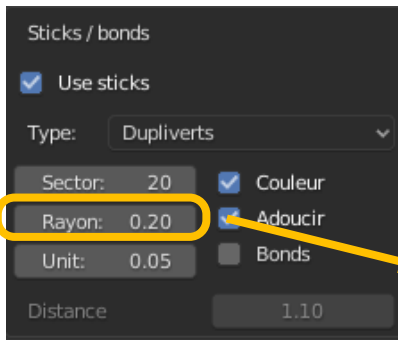


Premier paramètre à régler, le type modélisation pour les atomes, utiliser « NURBS » pour un meilleur rendu final.

Deuxième paramètre à régler, « Scaling factors Balls » à régler à 0.5 (attention à bien mettre un point et non une virgule)

En dessous de ces réglages, on a les réglages pour les liaisons.

Les molécules en fichier 3D



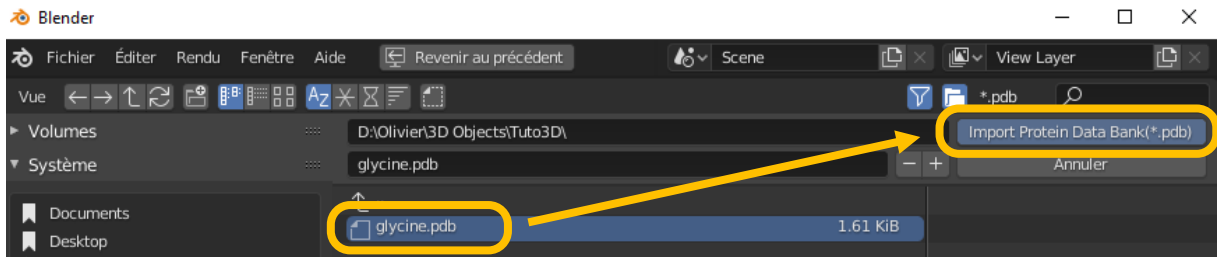
Par défaut, « Use sticks » est coché, par défaut également « type : Dupliverts », il n'y a rien à modifier.

On modifier la taille du rayon des liaisons à 0.10 pour qu'elle soit moins grosse que par défaut et il faut cocher la case « Bonds » pour avoir les liaisons multiples.

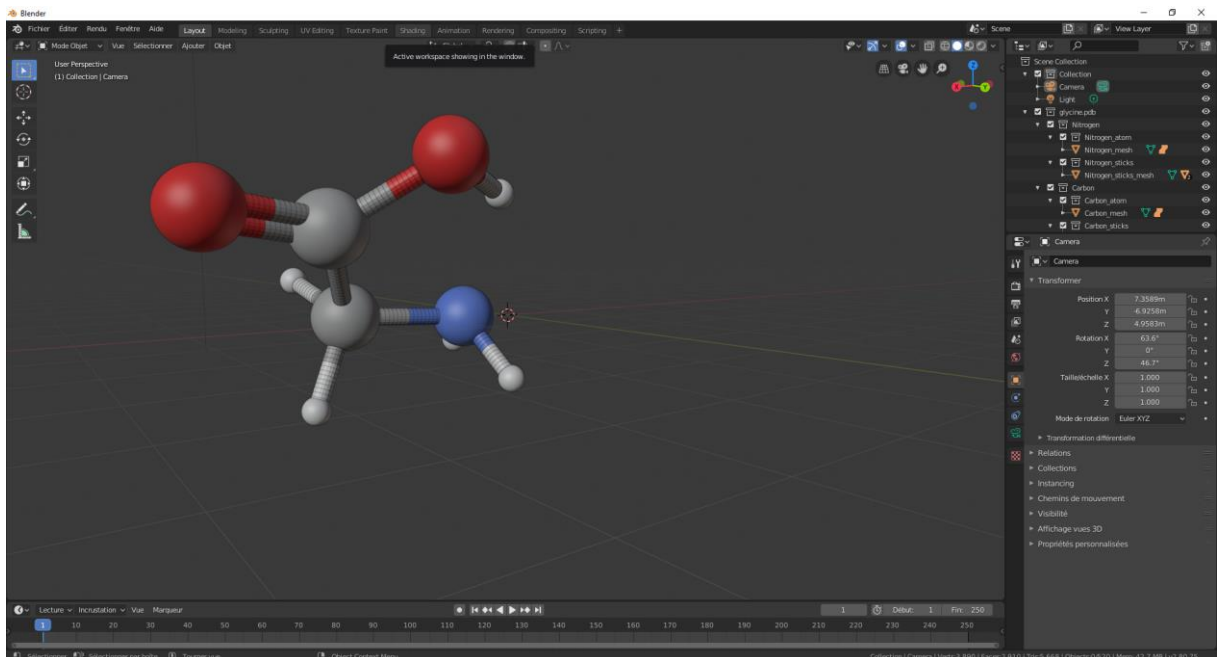


Tous les paramètres sont bien réglés.

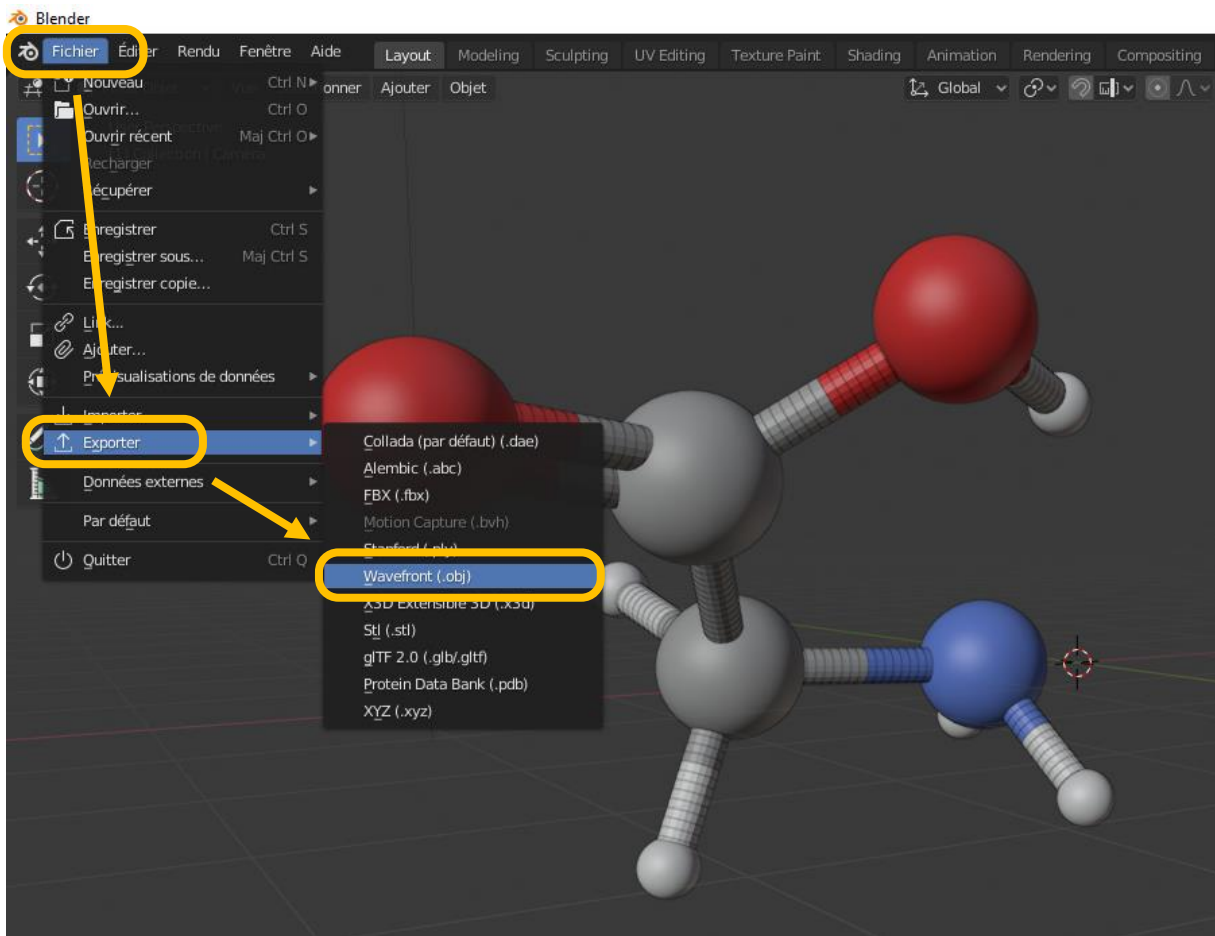
Etape 15. Importer le fichier .pdb



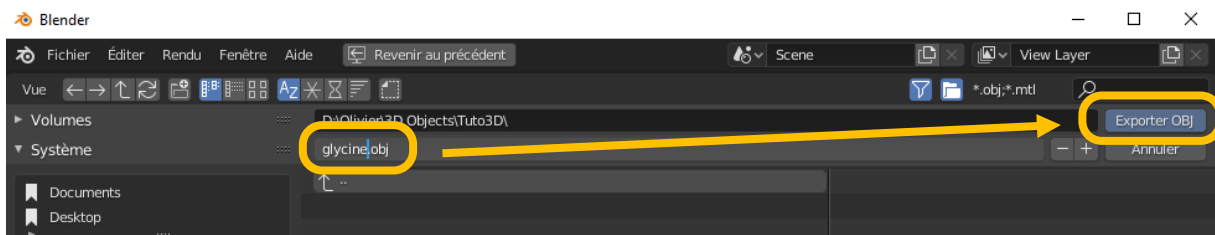
Il suffit de choisir le fichier à importer, glycine.pdb, et cliquer sur « Import Protein Data Bank (*.pdb) ». Le modèle 3D de la molécule apparaît dans Blender.



Etape 16. Exporter le modèle 3D en fichier 3D

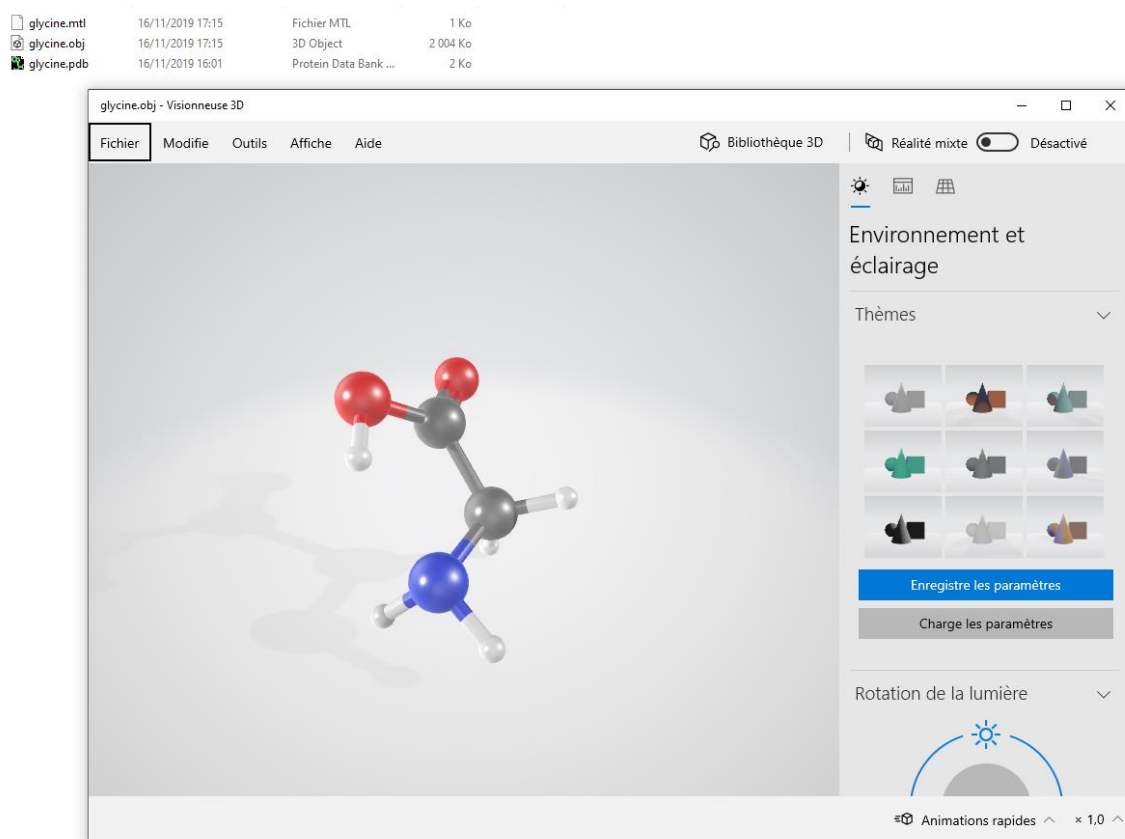


Dernière étape, l'export dans un fichier 3D. Le choix est large. Le format dépend de la finalité de l'objet 3D. Le format « Wavefront (.obj) » peut être utilisé avec les outils 3D fournis avec Windows10 par exemple.



Il suffit de choisir le nom du fichier puis de cliquer sur « Exporter OBJ ». Blender fait le reste. Vous avez un fichier 3D de la glycine ! Vous pouvez alors l'utiliser pour de la réalité virtuelle ou augmentée, pour de l'impression 3D, pour de l'animation 3D, etc.

Les molécules en fichier 3D



La glycine dans la visionneuse 3D de Windows.