

Mainmise sur la chiralité grâce à la réalité virtuelle

*L'usage et les apports de la réalité virtuelle pour la
familiarisation des élèves aux concepts 3D des molécules*

par Vincent FROGER* et Moïse CROCHET*, le 21/12/2022

* Laboratoire CERADE, équipe PAACT, ESAIP La Salle école d'ingénieurs,
18 rue du 8 mai 1945, 49124 Saint-Barthélemy-d'Anjou

A propos des auteurs



L'Ecole Supérieure Angevine d'Informatique et de Prévention des risques (**ESAIP**) est une école d'ingénieurs qui propose des formations initiales sous statuts étudiant et apprenti dans les domaines du **Numérique**, et de la **Gestion des risques et de l'Environnement**.



www.esaip.org



PhD. Vincent FROGER - Responsable des programmes scientifiques

Enseignant-chercheur à l'ESAIP depuis 2017, Vincent Froger est docteur ParisTech en génie énergétique. Ses activités de recherche concernent les domaines du photovoltaïque et du génie des procédés physico-chimiques. Il contribue également aux travaux d'innovation pédagogique en lien direct avec l'enseignement des sciences, en particulier sur les thématiques des travaux et des évaluations en groupe.



vfroger@esaip.org

PhD. Moïse CROCHET - Pilote de formation du cycle préparatoire



Enseignant-chercheur à l'ESAIP depuis 2011, Moïse Crochet est docteur en chimie, diplômé de l'Université des Sciences et Technologies de Lille. Également titulaire d'un diplôme universitaire en « Neurosciences et apprentissages tout au long de la vie » délivré par l'Université Catholique de l'Ouest, il met en application les principes de neuro-pédagogie pour perfectionner les enseignements scientifiques dispensés au sein de l'école.



mcrochet@esaip.org

Introduction et contexte

N.B. : un glossaire est présent en fin de document. N'hésitez pas à le consulter dans le cas où le sens de certains mots ou expressions serait trop technique pour vous ;-)

La scène se déroule dans les couloirs de l'école, à la sortie des salles de cours. Une conversation s'établit spontanément entre deux enseignants, auteurs de cet article :

- « - De nombreux élèves ne perçoivent toujours pas les différences entre les énantiomères. Je suis vraiment à court d'idées pour le leur faire comprendre...
- Je pense qu'ils comprennent bien le principe, mais qu'ils ont du mal à visualiser en trois dimensions les différences entre les molécules.
- Pourtant, on a bien étudié les modes de représentation dans l'espace. On a même fait quelques activités en salle informatique pour faire des modèles en 3D !
- Il faudrait qu'ils puissent manipuler les molécules dans leurs mains, pour que ce soit plus évident. On pourrait imaginer quelque chose comme un jeu de construction ?
- Ce serait bien, mais cela nécessiterait beaucoup de pièces. Et puis nous serions rapidement confrontés à des formes assez complexes à reproduire. »

Et voici comment le projet **Mainmise sur la chiralité**, souhaitant répondre à l'ensemble de ces problématiques, a été initié au cours de cette année 2022 à l'ESAIP. Le document que vous allez lire relate les différentes étapes et les aboutissements de ce défi, mené conjointement par les élèves et les enseignants.



A travers cet article, nous allons donc explorer le thème passionnant de la chiralité en chimie moléculaire, et voir comment renforcer sa compréhension auprès des apprenants via le principe incroyable de la réalité virtuelle. Une immersion complète dans les univers de la science, de la technologie, et de l'éducation.

Le principe de la réalité virtuelle

Au cours des trente dernières années, l'expression "réalité virtuelle" est progressivement apparue pour décrire à la fois l'appareillage (casque, manettes) servant d'interface avec le monde numérique, ainsi que l'attitude des personnes (gestes, réactions) qui l'utilisent, et l'usage qu'ils en font. La plupart du temps, la réalité virtuelle est même simplement réduite à l'appareillage en lui-même, ce qui occulte totalement le principe mis en jeu.

Afin de mieux comprendre de quoi il s'agit, nous allons commencer par définir les principaux contours de la réalité virtuelle. Pour celles et ceux qui souhaiteraient en avoir une connaissance détaillée, nous les invitons à lire l'excellent *Traité de la réalité virtuelle* (Fuchs, 2006) dont la référence est donnée à la fin de cet article, et dont les notions présentées dans cette partie sont issues du Volume 2 de ce traité.



L'expression française "réalité virtuelle" provient de la traduction directe de l'expression anglaise "virtual reality". C'est un oxymore, c'est-à-dire l'association de deux termes en totale contradiction. Ceci-dit, une meilleure traduction de "virtual reality" serait plutôt "réalité de substitution", puisque sa finalité est de permettre à une ou plusieurs personnes une **activité sensorielle, motrice et cognitive dans un monde artificiel**. Ce monde artificiel, créé numériquement et que l'on appellera environnement virtuel, peut être imaginaire, symbolique ou bien une simulation de certains aspects du monde réel.

L'idée de la réalité virtuelle est donc basée sur le fait qu'une personne interagit dans un environnement virtuel avec les éléments et les entités qui s'y trouvent, que ce soit des objets, des mécanismes ou bien des personnages (avatars). La diversité des origines de ces mondes artificiels est donc un enjeu crucial pour pouvoir obtenir une immersion réussie de l'utilisateur.

Parmi ces différentes origines, on distingue principalement :

- La **simulation de certains aspects du monde réel**, comme par exemple la gravité sur les objets que l'on peut saisir, puis lâcher, ou encore le son que produirait cet objet quand il atteint le sol. Ces simulations renforcent l'effet immersif en reproduisant des effets qu'une personne est en mesure d'observer ou de ressentir dans le monde réel ;
- Le **monde symbolique**, qui permet d'afficher des informations ou des éléments schématiques permettant à l'utilisateur une meilleure compréhension des tâches à effectuer, ou une meilleure perception mentale de son environnement. Par exemple, le changement de couleur d'un objet déplacé basculant du vert (position correcte) au rouge (position incorrecte), ou encore le signalement d'un danger imminent ;

- Le **monde imaginaire** (irréel), qui est purement imaginaire. Il sert principalement à l'expression artistique du concepteur, à amplifier des situations ou des phénomènes au-delà du réel, ou bien à introduire des éléments de science-fiction. Les lois du monde réel y sont très peu présentes, et l'ambiance obtenue contribue le plus souvent à rechercher une émotion particulière de l'utilisateur au moment de ces interactions (émerveillement, angoisse...).

De par leur combinaison, les origines des environnements dans lesquels les utilisateurs peuvent évoluer garantissent une ressource d'une extrême richesse pour les concepteurs des applications, qui sont de moins en moins limités techniquement étant donné les progrès et les avancées informatiques de ces dernières années.

Fonctionnellement parlant, la réalité virtuelle doit donc permettre à un ou plusieurs utilisateurs de s'extraire du monde réel afin d'interagir dans un environnement virtuel. Cela implique donc nécessairement de se détacher des notions de lieu, de temps et d'action, si chères aux auteurs littéraires du XVII^{ème} siècle. En effet, pour réussir une immersion dans un environnement virtuel, il faut que l'utilisateur puisse constater un changement sur au moins tout ou partie de ces trois paramètres.

Une définition technique de la **réalité virtuelle (VR)** communément admise par les différentes communautés scientifiques serait donc (Arnaldi et al., 2003) :



La réalité virtuelle est un domaine scientifique et technique exploitant l'informatique et des interfaces comportementales en vue de simuler dans un monde virtuel le comportement d'entités 3D qui sont en interaction en temps réel entre elles et avec un ou des utilisateurs en immersion pseudo-naturelle par l'intermédiaire de canaux sensori-moteurs.

Les mots clefs à retenir de cette définition sont l'**interaction** et l'**immersion**, qui doivent nécessairement être réalisées simultanément pour qu'on puisse parler d'un système VR. Il faut aussi noter que l'interaction doit pouvoir s'effectuer en temps réel, c'est-à-dire sans décalage entre l'action initiée dans l'environnement virtuel, et la réponse sensorielle liée à cette dernière.

Cette définition nous renseigne également sur un certain nombre d'éléments indispensables à ce domaine :

- L'informatique implique l'usage de **matériels** et de **logiciels**, de façon à ce que les interactions, simulations ou animations puissent être interfacées avec l'utilisateur ;
- Les **interfaces comportementales** impliquent un matériel spécifique sollicitant soit l'aspect sensoriel (vue, ouïe, toucher...) perceptible par l'utilisateur, soit l'aspect moteur (action, déplacement...) perceptible par l'informatique. Les interfaces sensori-motrices mettant en jeu simultanément les deux aspects.

Cette définition technique peut aussi être ramenée à un schéma plus simple, représentant la boucle mise en jeu dans tout système VR. C'est par cette boucle qu'un utilisateur acquiert la conscience des événements et des éléments de l'environnement virtuel dans lequel il est immergé et en interaction (Figure 1). Ce processus physiologique est communément appelé la **cognition**.

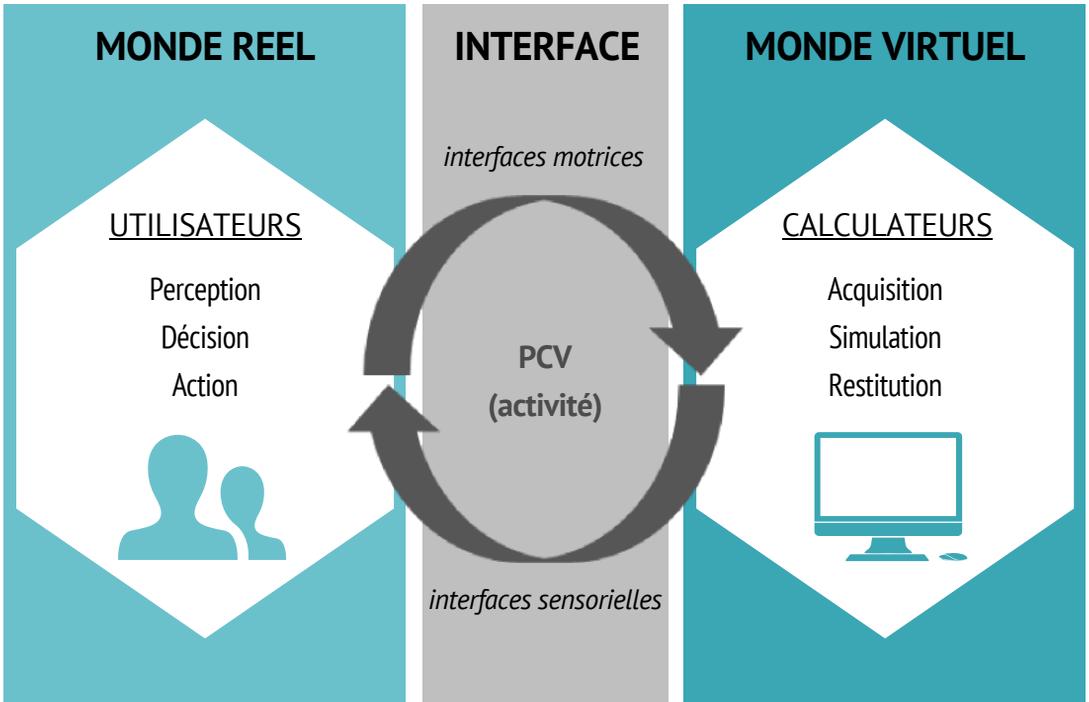


Figure 1. Boucle d'activité en environnement virtuel interactif (Fuchs et al., 1999).

L'activité de l'utilisateur se fait toujours à travers l'interface. Quelle que soit l'application utilisée, les actions effectuées par l'utilisateur peuvent toujours être décomposées à l'aide de quatre **primitives comportementales virtuelles (PCV)** :

- Observer le monde virtuel ;
- Se déplacer dans le monde virtuel ;
- Agir sur le monde virtuel ;
- Communiquer avec autrui ou avec l'application.

D'un point de vue technologique, on comprend donc maintenant que l'appareillage utilisé de nos jours ne fait qu'accomplir le rôle d'interface. Typiquement, celui-ci comprend pour chaque utilisateur un visiocasque (vue 3D sur 360°), deux manettes (toucher, actions), leurs capteurs associés (déplacements), ainsi que des écouteurs (ouïe) et un microphone (communication). Nous reviendrons sur le matériel utilisé plus loin dans cet article.

Réalité virtuelle et chimie moléculaire : vers un usage pédagogique

Depuis environ trois ans, les travaux de recherche et d'enseignement visant à exploiter la réalité virtuelle à des fins pédagogiques se multiplient. La raison principale étant l'arrivée sur le marché de nouvelles générations de visiocasques permettant une intégration plus aisée aux différentes activités pédagogiques envisagées. Petit focus sur l'une des disciplines scientifiques qui se prête volontiers aux principes de la réalité virtuelle : la chimie moléculaire.

Quel que soit le domaine concerné, la majeure partie des applications VR à visée pédagogique cherche à mettre fortement l'accent sur des aspects **pratiques et ludiques**, et relativement peu sur des exercices théoriques (Radianti et al., 2020). Cette tendance générale est également observée dans le domaine de la chimie, où la plupart des travaux ont ciblé spécifiquement deux thèmes : l'activité en laboratoire, et la structuration des molécules.

Les projets lancés sur le premier thème permettent aux **apprenants** (élèves) de se retrouver immergés au sein d'un laboratoire virtuel, afin de mieux appréhender le matériel qui s'y trouve, les gestes à réaliser, et les risques qui y sont liés (CNAM, 2022), (Astuti et al., 2020). Un exemple de "vue utilisateur" pour de tels environnements virtuels est présenté sur la Figure 2.



Figure 2. Environnement virtuel utilisé pour les bonnes pratiques en laboratoire (CNAM, 2022).

Le second thème est celui auquel notre article se rapportera. Parmi les travaux qui ont été récemment menés, deux d'entre eux ont retenu notre attention, avec des réalisations proches de celle que nous souhaitons accomplir.

Une étude des apports de la VR en chimie sur l'**engagement** et la **compréhension** des apprenants à travers les thèmes de la stéréoisométrie et de la théorie VSEPR a permis la réalisation d'un environnement virtuel doté de plusieurs activités à réaliser (Georges-Williams et al., 2020).

Ces thèmes se rapportent aux notions de structure, de composition et de géométrie des molécules dans l'espace, ainsi que les modèles symboliques qui y sont liés.

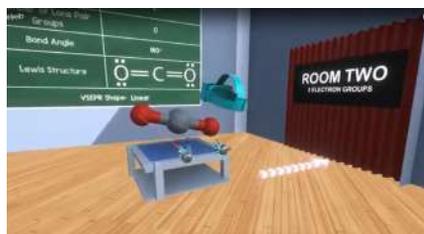


Figure 3. Environnement virtuel utilisé pour l'introduction à la théorie VSEPR (Georges-Williams et al., 2020, p. 18).

La Figure 3 illustre une partie de l'environnement virtuel créé, avec une "vue omnisciente". En effet, la "vue utilisateur" présentée sur la Figure 2 permet de voir "à travers les yeux" d'un utilisateur, alors que la "vue omnisciente" permet de visualiser l'avatar de l'utilisateur dans l'environnement virtuel. Sur la Figure 3, vous pouvez situer l'utilisateur au niveau du visiocasque bleu et des gants présents devant la petite table.

En lévitation au-dessus de cette table basse, vous pouvez aussi remarquer la présence d'une molécule dans une de ces **représentations symboliques**. Une autre représentation symbolique de cette même molécule (structure de Lewis) est inscrite sur le tableau lui faisant face.

Dans cette application, l'apprenant peut saisir des molécules tout en suivant les consignes et indications écrites sur les murs autour de lui, et en se déplaçant de pièce en pièce (room). Ainsi, toutes les actions et activités à réaliser dans l'environnement virtuel ne se font pas dans le même "lieu virtuel". Les concepteurs ont aussi prévu une activité ludique de tri de molécules à saisir et à déposer dans des containers selon leurs propriétés.

Un autre projet relativement abouti est le serious game *Liaisons : sauvetage chimique* (Parrot, 2022). Traitant de chimie générale, mais sur des notions relativement proches de l'étude précédente, les concepteurs ont préféré miser sur un contexte scénarisé, et faire évoluer l'utilisateur au sein d'un lobby (antichambre). Dans un même lieu virtuel, l'utilisateur agit directement sur des menus interactifs affichés autour de lui, et peut ponctuellement se retrouver en totale immersion dans des cinématiques (animations), notamment à l'échelle submicroscopique.

Si dans cette application l'apprenant ne peut pas saisir à proprement dit les entités chimiques, il se sent bien plus concerné par les consignes données, par le contexte scénarisé, mais aussi par la présence d'un personnage virtuel (robot) qui communique directement via des bulles de dialogues avec l'apprenant.

Ces deux travaux ont déjà eu l'opportunité d'être déployés au cours de **séances de face-à-face**. Les retours d'expérience précisent tous une amélioration significative de la compréhension des notions abordées, en particulier les plus complexes, ainsi que l'engagement des élèves au cours de ces activités. Ceux-ci sont corroborés par les conclusions d'autres articles relevant d'un usage d'applications VR similaires (Mouneyrou et al., 2019), (Astuti et al., 2020).

Cependant, le développement des environnements virtuels à un seul utilisateur, comme c'est le cas ici, ne doit pas s'affranchir du **rôle de l'enseignant**. En effet, même si celui-ci n'est pas virtuellement présent dans l'environnement, il n'en demeure pas moins actif avec un rôle d'appui, voir de modérateur sur l'utilisation faite par les apprenants. Qui plus est, son intervention en amont de la séance, pour fixer les objectifs, ainsi qu'en aval, pour organiser une restitution des apprentissages, demeure primordiale. La posture choisie par un enseignant peut être différente selon l'application utilisée, les exigences pédagogiques, et surtout les compétences visées (Weber et al., 2018).



Introduction à la stéréochimie

La chimie étudie la matière et ses propriétés. La matière est constituée de briques élémentaires que l'on appelle les **atomes**, du grec "atomos" qui signifie "insécable", comportant un noyau qui contient des particules élémentaires – des électrons et des protons –, lui-même entouré d'un nuage électronique. Les atomes peuvent se lier entre eux par le biais de liaisons chimiques, pour former des **molécules**. Ainsi à l'échelle microscopique, la matière est un assemblage plus ou moins organisé d'un grand nombre d'atomes ou de molécules.

La plupart des molécules chimiques ne sont pas planes mais tridimensionnelles. L'étude de l'organisation spatiale des molécules se nomme la **stéréochimie**. Lorsque l'on parle de stéréochimie, il convient de distinguer la stéréochimie dite « statique », qui met en évidence simplement l'arrangement des atomes au sein d'une molécule, de la stéréochimie « dynamique » qui étudie la variation des structures spatiales au cours des réactions chimiques.

Afin de mieux saisir l'enjeu de la manipulation 3D, notamment lorsque l'on parle de chiralité, nous allons dans un premier temps revenir sur quelques points essentiels à propos de la stéréochimie. Parmi les nombreux ouvrages de chimie qui traitent de ces notions, nous pouvons inviter le lecteur à consulter par exemple ceux de (Grécias et al., 2009), (Rouquérol et al., 2016), (Chelain et al., 2021) ou encore (Perrio et al., 2017). C'est notamment dans ce dernier ouvrage que sont extraites les illustrations de cette partie.

Parfois, pour une même formule brute, il existe différentes structures moléculaires couramment appelées **isomères** (Figure 4). Les isomères de constitution ont des formules développées planes différentes, alors que les isomères stériques ou stéréoisomères, diffèrent par la disposition spatiale de leurs atomes. La stéréoisomérisation est donc la relation entre deux stéréoisomères. Deux stéréoisomères peuvent différer par leur configuration ou par leur conformation.

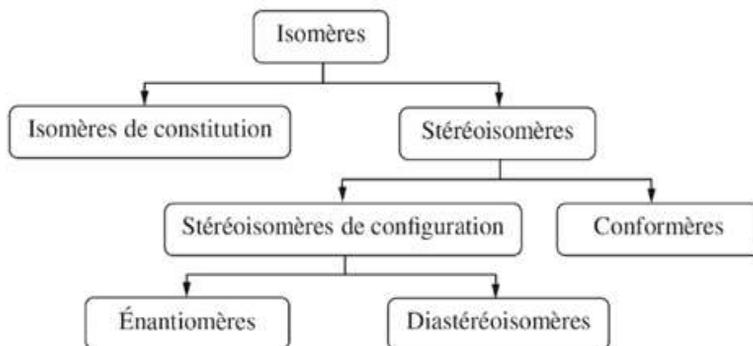


Figure 4. Les différents types d'isomérisation (Perrio et al., 2017).

Les stéréoisomères de conformation, ou **conformères** sont les différentes formes d'une même molécule dans des conformations différentes. Les conformations correspondent aux différentes dispositions spatiales des atomes d'une molécule, sans modification de la connectivité de ces atomes. Les conformères ne diffèrent que par la libre rotation autour de liaisons simples. Ils peuvent être détectés par des techniques spectrales, mais il n'est pas possible de les séparer (Figure 5).

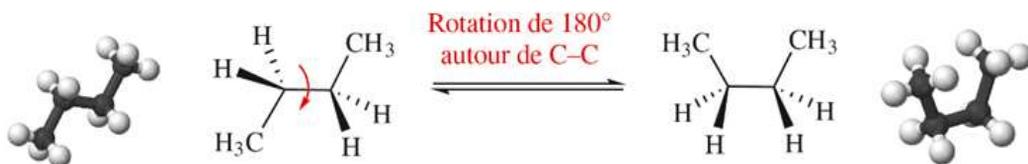


Figure 5. Deux conformères du butane (Perrio et al., 2017)

Les stéréoisomères de configuration sont des molécules différentes. Le passage d'un stéréoisomère de configuration à un autre nécessite une rupture de liaisons (Figure 6). D'une manière générale, deux stéréoisomères de configuration sont soit des énantiomères, soit des diastéréoisomères.

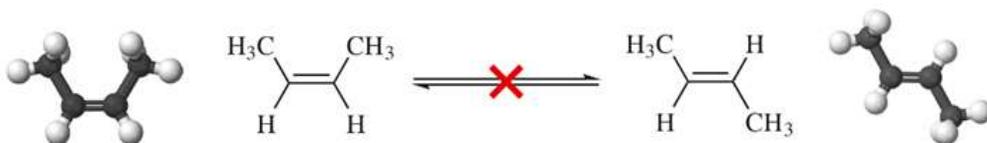


Figure 6. Les deux stéréoisomères de configuration du but-2-ène (Perrio et al., 2017)

Les **énantiomères** sont des molécules images l'une de l'autre dans un miroir, et non superposables. D'ailleurs, les mots antipodes ou inverses optiques sont des synonymes d'énantiomères (Figure 7).

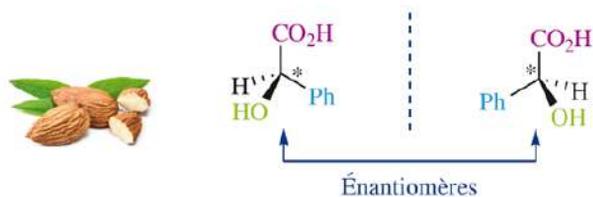


Figure 7. Les deux énantiomères de l'acide mandélique (Perrio, et al., 2017)

La diastéréoisomérisie est la relation qui lie deux stéréoisomères dont les configurations ne sont pas des images spéculaires (Figure 8). On parle alors de **diastéréoisomères**.

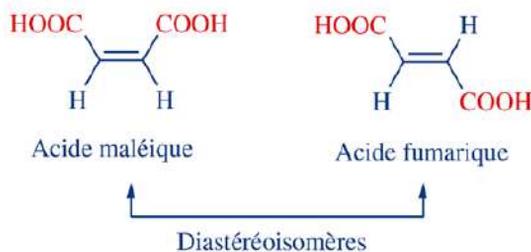


Figure 8. Les deux diastéréoisomères de l'acide but-2-ène-1,4-dioïque (Perrio et al., 2017)

Grâce aux règles séquentielles CIP, on peut distinguer sans ambiguïté la configuration d'un stéréoisomère selon sa structure et l'**élément stéréogène** qu'il comporte.

Parmi les éléments stéréogènes les plus fréquemment rencontrés en chimie organique, on retiendra l'atome de **carbone asymétrique** C*, et la **double liaison** C=C. Une fois l'élément stéréogène identifié, on peut alors procéder à la nomenclature des énantiomères et des diastéréoisomères.

Pour les énantiomères, comme illustré sur la Figure 9, deux configurations sont possibles autour du carbone asymétrique placé au centre de la molécule :

- la configuration R, du latin *rectus*, qui signifie "droit", dans laquelle les substituants sont arrangés de telle sorte que leur priorité décrive une rotation dans le sens horaire ;
- la configuration S, du latin *sinister*, qui signifie "gauche", dans laquelle on observe une rotation anti-horaire des substituants selon leur priorité.

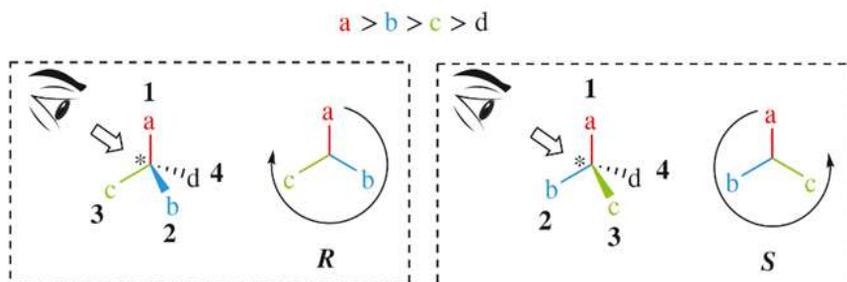


Figure 9. Configurations R et S d'un atome de carbone asymétrique (Perrio et al., 2017)

En biochimie, on utilise fréquemment les notations (D) et (L), pour qualifier la stéréochimie des glucides et des acides aminés que l'on représente généralement selon la projection de Fischer (Figure 10). Dans cet exemple, le groupement amine porté par le carbone asymétrique est situé à droite de l'axe formé par la chaîne carbonée, par convention il s'agit alors de l'énantiomère (D). Inversement, lorsque le groupement amine est situé à gauche, il s'agit de la configuration (L).

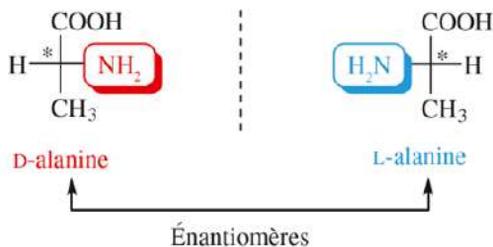


Figure 10. Les énantiomères de l'acide 2-aminopropanoïque (alanine) (Perrio et al., 2017).

Le groupement amine (NH_2) est repéré par les couleurs bleu et rouge.

La diastéréoisomérisation géométrique quant à elle concerne les hydrocarbures insaturés présentant au moins une double liaison carbone-carbone. En fonction de la position relative des substituants, on distingue :

- le stéréoisomère de configuration Z, de l'allemand *zusammen*, qui signifie "ensemble" ;
- le stéréoisomère de configuration E, de l'allemand *entgegen*, qui signifie "opposé".

La chiralité : définition, propriétés et enjeux pour la manipulation 3D

Le mot **chiral** vient du mot grec "kheir" qui signifie "main". En effet, la main gauche et la main droite sont images l'une de l'autre dans un miroir, mais on ne peut pas les superposer (Perrio et al., 2017, p. 182) :



Une molécule chirale est une molécule qui n'est pas identique à son image dans un miroir. Inversement, une molécule superposable à son image dans un miroir (image spéculaire) est dite achirale.

Une molécule chirale existe donc sous la forme de deux énantiomères. L'atome de carbone asymétrique constitue l'élément de chiralité le plus fréquemment rencontré en chimie organique.

La symétrie plane conserve les distances. Deux énantiomères ont donc des représentations spatiales telles que les interactions entre groupements sont identiques. Il en résulte des propriétés physiques identiques : mêmes points de fusion et d'ébullition, même masse volumique, mêmes spectres RMN, IR, UV-visible, etc.

Du fait de ces similitudes, les énantiomères sont **difficilement séparables**, et ils ont la même réactivité chimique en présence de réactifs achiraux. Par contre, deux énantiomères ont un pouvoir rotatoire de signe opposé. Ces molécules possèdent une activité optique, c'est-à-dire qu'elles ont la capacité de dévier d'un certain angle le plan de polarisation d'une onde polarisée. La mesure du pouvoir rotatoire s'effectue à l'aide d'un polarimètre :

- Si la déviation du plan de la lumière polarisée est vers la droite, le pouvoir rotatoire est positif et le composé est dit **dextrogyre** ;
- A l'inverse le composé sera **lévogyre** (pouvoir rotatoire négatif) si la déviation du plan de la lumière polarisée est vers la gauche.

De très nombreux composés sont optiquement actifs : le quartz alpha, l'essence de térébenthine, les vapeurs de camphre, une solution aqueuse de glucose ou de saccharose, etc. On notera qu'il n'y a aucune relation entre les configurations (D) ou (L) d'une molécule et son pouvoir rotatoire : une molécule (D) peut être lévogyre et inversement. Ainsi par exemple, tous les acides aminés naturels sont (L), et seuls certains sont dextrogyres.

La stéréoisomérisation de configuration est une notion fondamentale en biochimie. En effet, le monde vivant est asymétrique, de telle sorte que la nature fabrique des molécules stéréospécifiques. Ainsi, les propriétés biochimiques d'une substance, mais également son goût, son odeur, ses propriétés pharmacologiques, etc. sont totalement dépendantes de sa configuration.

Parmi les molécules chirales que l'on peut retrouver dans la nature, on peut citer par exemple les acides aminés, les sucres ou encore l'ADN. Lorsque l'on associe une molécule chirale et une protéine, qui présente elle-même des cavités chirales, plusieurs combinaisons peuvent s'opérer, même si naturellement, la formation de l'une d'entre elles est toujours prépondérante devant les autres : on parle de **discrimination chirale**. Le stéréoisomère chirale non actif sur la protéine considérée peut interagir sur un site moins sélectif et provoquer une réponse biologique totalement différente (Perrio et al., 2017, p. 185).

En effet, les **produits pharmaceutiques** synthétiques sont tels que souvent une seule forme optique est physiologiquement active. Autrement dit, l'activité pharmacologique d'une molécule n'est souvent portée que par un seul des énantiomères. Le second, dans le meilleur des cas, se révèle peu actif, mais il peut aussi être responsable d'une activité biologique opposée, voire d'effets secondaires délétères.

Outre son importance en chimie thérapeutique, la chiralité joue également un rôle dans la reconnaissance des odeurs. En effet, les **récepteurs olfactifs** sont sensibles à la structure tridimensionnelle des molécules. L'exemple le plus marquant est celui de la (R)-carvone qui a une odeur de menthe, alors que la (S)-carvone sent le cumin (Figure 11). De même, le limonène a soit une odeur de citron, soit une odeur d'orange, selon sa configuration R ou S.

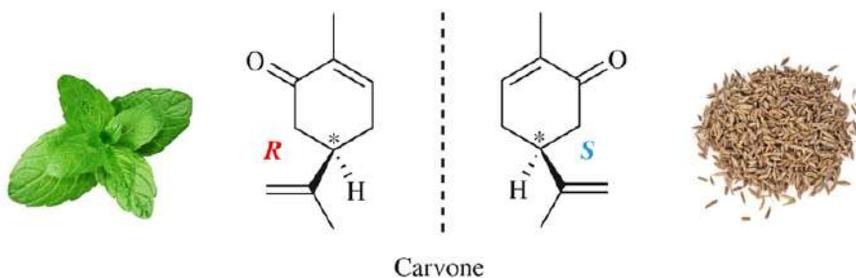


Figure 11. Les deux énantiomères de la carvone (Perrio et al., 2017)

Dans certains secteurs, il est très utile de pouvoir produire sélectivement l'espèce dextrogyre ou lévogyre d'une molécule, c'est le cas notamment dans l'**industrie des arômes**. Le problème se pose de façon plus cruciale dans l'industrie pharmaceutique : comme évoqué précédemment, les principes actifs issus de la pharmacopée sont souvent composés de molécules chirales, dont l'une peut avoir un intérêt thérapeutique tandis que l'autre est dangereuse.

Le développement des outils numériques permet aujourd'hui de déterminer avec une grande précision les distances et les angles qui définissent la position relative des atomes au sein d'une molécule. Pour autant, il est difficile d'observer réellement ces molécules, et les chimistes ont dû imaginer des représentations pour les visualiser dans l'espace.

Parmi ces représentations, on peut citer la représentation de Cram, les projections de Fischer ou de Newman par exemple. Toutefois, ces représentations constituent de simples "modèles 2D" pour imaginer ce que serait la représentation d'une molécule dans l'espace.

Pour faciliter la visualisation d'une molécule tridimensionnelle, l'enseignement de la chimie a souvent recours à l'utilisation de modèles moléculaires, de véritables **jeux de construction** qui permettent aux apprenants d'assembler des pièces entre elles, généralement des billes de couleur représentant les divers atomes d'une molécule. Ces maquettes présentent malgré tout un inconvénient majeur, le nombre et la taille des molécules restent limités par la disponibilité du nombre de billes présentes dans ces kits de construction.

L'informatique a apporté de puissants moyens en matière de représentation 3D. Certains logiciels permettent d'obtenir la représentation de molécules très complexes, à partir de leur formule structurale et des données de base (distances, angles, rayons atomiques). Il est possible de faire pivoter la molécule autour d'un axe choisi. On peut aussi visualiser les déformations du squelette de la molécule, lorsqu'elle vibre ou à l'approche d'une autre molécule par exemple. Contrairement aux maquettes, l'élève peut ainsi à sa guise construire les molécules chimiques et les visualiser en 3D, sans être limité par le nombre d'atomes ou de liaisons chimiques. Il est tout à fait possible de construire par exemple des macromolécules, des polymères ou des hydrocarbures aromatiques polycycliques.

Contrairement aux kits de construction qui n'offrent que peu de choix en termes d'atomes, généralement 5 ou 6 parmi lesquels on retrouve les atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène, d'azote, de soufre ou de phosphore, la liberté de construction est totale avec les outils numériques, permettant d'envisager la construction de molécules contenant tout ou partie des 118 éléments chimiques identifiés à ce jour. Cependant, maintenir cet usage uniquement à travers un écran d'ordinateur classique supprime la partie manipulation, qui reste essentielle à la bonne compréhension de ces notions chez les apprenants.

La réalité virtuelle se pose alors comme une excellente alternative à ces problèmes, car elle permet d'envisager la combinaison des deux avantages : la **liberté de construction** et la **manipulation**. Enfin, en fonction du paramétrage de l'outil 3D utilisé, on peut tout à fait imaginer moduler la taille des atomes pour avoir une vision plus précise de l'encombrement stérique des molécules.



Outils utilisés et appropriation : un projet porté par les élèves, pour les élèves

Les notions de réalité virtuelle et de chiralité ayant été définies, intéressons nous désormais au projet en lui-même. A partir de toutes les données rassemblées, et des besoins exprimés lors de l'introduction, un **cahier des charges** a été défini, englobant les points suivants :

- Usage d'un espace facilement aménageable ou modulable, pour ne pas contraindre le(s) utilisateur(s) (Mouneyrou et al., 2019) ;
- Usage d'un logiciel facile à prendre en main pour la partie conception (hors codage) ;
- Conception d'un environnement virtuel de type lobby, permettant d'effectuer **plusieurs activités pédagogiques** afin d'améliorer la compréhension du concept de chiralité en chimie moléculaire ;
- Déploiement d'une vue VR extérieure (utilisateur ou omnisciente) afin que les spectateurs puissent observer le déroulé des activités ;
- Au moins une des activités doit comporter un **jeu de construction** en lien direct avec la structure 3D des molécules.

Etant donné qu'il s'agit d'un projet pédagogique à destination des apprenants, nous avons pris le parti de déléguer la partie conception auprès d'un groupe d'élèves de deuxième année de la filière Numérique, dans le cadre d'un **projet scientifique** qu'ils doivent réaliser en groupe (Figure 12). Ainsi, en utilisant directement la vision et la perception de la chiralité par les élèves eux-mêmes, nous espérons obtenir un environnement virtuel répondant aux difficultés réelles de compréhension de ces notions, et en accentuer l'appropriation.



Figure 12. Groupe d'élèves concepteurs.
(Alix, Romain, Mathis, Baptiste, Mattieu)

D'un point de vue matériel, plusieurs visiocasques ont servi à la conception et à l'utilisation (HTC Vive Pro 2, Oculus Quest 2). Etant donné que les maîtres mots de la réalité virtuelle sont l'interaction et l'immersion, nous avons exclusivement utilisé la station debout pour la pratique VR. Un espace d'environ 9 m² étant requis pour ce mode, nous avons également choisi comme lieux de pratique les **salles d'innovation pédagogique** de l'école, dont le mobilier est facilement modulable (Figure 13). En revanche, les aspects audio ne seront pas exploités dans ce projet, leur intérêt étant très limité au vu de nos objectifs.

En terme de logiciel, nous avons choisi d'utiliser l'application **Gravity Sketch™**, qui est gratuite et disponible aussi bien sur les plateformes [Steam](#) qu'[Oculus Store](#). Cette application et son extension permettent d'effectuer de la modélisation 3D à l'aide de fonctions prédéfinies, ce qui permet une prise en main simple et intuitive.



Conception de l'environnement VR et de l'atelier interactif

A partir du cahier des charges établi, et sur la base des travaux décrits précédemment, la conception de l'environnement virtuel nécessaire à ce projet a pris d'emblée une orientation assez précise. L'idée de travailler au sein d'un **lobby doté de plusieurs stands** auxquels l'utilisateur (apprenant) doit se rendre pour effectuer les activités pédagogiques s'est imposée. Le déplacement de l'utilisateur à l'intérieur de l'application étant géré par la téléportation de point en point ou à pas réels, cela donne un aspect exploratoire relativement intéressant à exploiter en termes d'immersion et de curiosité.

L'autre élément clef de l'environnement virtuel réalisé est la possibilité de **saisir et manipuler les molécules** dans leur représentation symbolique. L'idée de pouvoir renforcer la compréhension des représentations 3D des molécules nécessite forcément cette manipulation. Ainsi, un utilisateur aura la possibilité d'attraper toutes les molécules présentes autour de lui, et de les tourner ou les incliner à volonté.

Afin de ne pas laisser l'utilisateur seul face aux problèmes proposés sur chaque stand, nous avons pris le parti de limiter les consignes inscrites à l'intérieur de l'environnement virtuel. Etant donné que pour nous l'intervention de l'enseignant (formateur) est indispensable à la bonne utilisation et à la bonne compréhension du concept, celui-ci aura la charge de donner directement les consignes, l'aide et les explications à l'oral, tout en accompagnant l'utilisateur dans son expérience (Figure 13). Cet **accompagnement** est obligatoire afin de toujours pouvoir conseiller l'utilisateur pour la maîtrise de sa gestuelle en toute sécurité. Cela nécessite donc aussi le **partage de la vue VR** (vue utilisateur) afin de voir et repérer ce qu'est en train de faire l'utilisateur (Figure 14).

Le lobby créé par l'équipe conceptrice est constitué de trois stands, sur lesquels une activité différente liée au concept de chiralité est proposée. L'utilisateur doit nécessairement réaliser les **activités proposées dans un ordre précis**, car celles-ci ont été imaginées de façon à respecter le schéma pédagogique suivant :

Stand 1. Principe de la chiralité

Stand 2. Etude de cas sur des molécules chirales

Stand 3. Reconstruction d'un énantiomère à partir d'un modèle



Figure 13. Accompagnement de l'utilisateur pour ne pas le laisser prendre un risque.



Figure 14. Partage et projection de la vue VR.

Le Stand 1. permet à l'utilisateur de se positionner devant un pupitre, sur lequel sont posées deux mains qu'il peut saisir à l'aide des manettes (Figure 15). Le défi lancé par l'enseignant à l'utilisateur est de **tenter de superposer parfaitement la main droite sur la main gauche**. Face à l'impossibilité de réaliser parfaitement cette superposition, l'utilisateur bénéficie alors des explications adéquates sur le principe de chiralité de façon générale et vulgarisée.

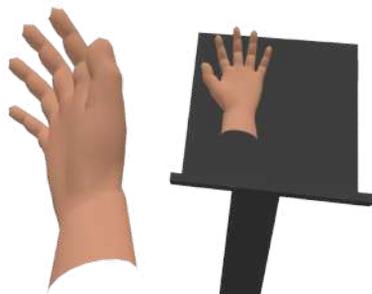


Figure 15. Pupitre du Stand 1.

Après cette première activité, l'utilisateur est invité à se déplacer vers le Stand 2. Cette fois-ci, il va devoir identifier à partir de **plusieurs jeux de molécules semblables** si celles-ci sont des énantiomères ou non, toujours en tentant d'obtenir une superposition parfaite entre les objets symboliques qu'il peut saisir et manipuler à sa guise.

Les jeux de molécules sont rangés deux par deux sur des étagères (box). Les molécules sont initialement orientées de sorte qu'au premier coup d'œil l'utilisateur soit dans l'incapacité de statuer sur la superposition ou non des molécules proposées. Il est donc obligé de les saisir et de les tourner dans l'espace pour pouvoir répondre. Les exemples de thalidomide (droite) et du bromochlorofluorométhane (gauche) sont illustrés sur la Figure 16. Les deux molécules proposées pour la thalidomide sont identiques, l'utilisateur pourra donc les superposer. Pour l'autre espèce chimique, ce ne sera pas le cas. Au cours de cet exercice, c'est aussi l'occasion pour l'enseignant de renseigner l'utilisateur sur les conséquences de l'usage de tel ou tel énantiomère, par exemple sur le plan biomédical pour les énantiomères de la thalidomide.

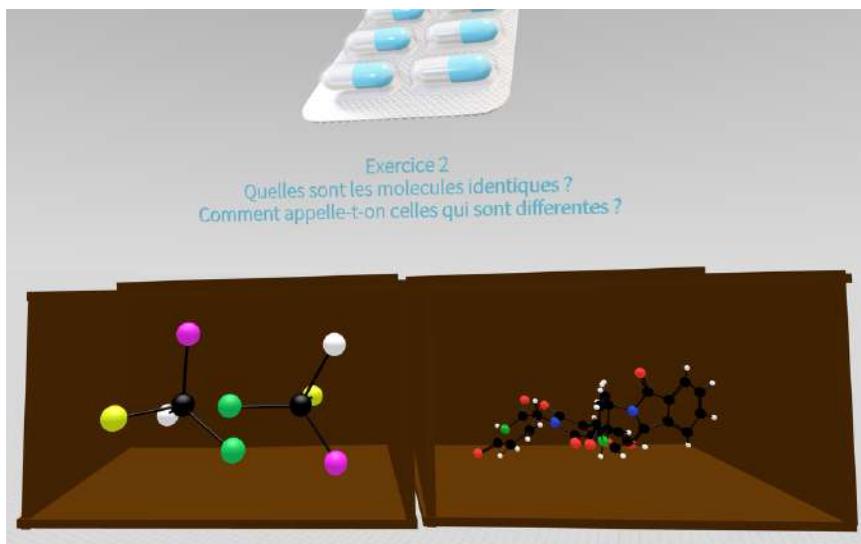


Figure 16. Les étagères du Stand 2. présentant les deux jeux de molécules à saisir.

Le troisième stand permet à l'utilisateur d'essayer de fabriquer lui-même sa propre molécule. L'idée du jeu de construction a été matérialisé par l'intermédiaire d'une boutique (shop), correspondant à un étalage où sont en libre d'accès différents atomes et différentes liaisons chimiques (Figure 17).

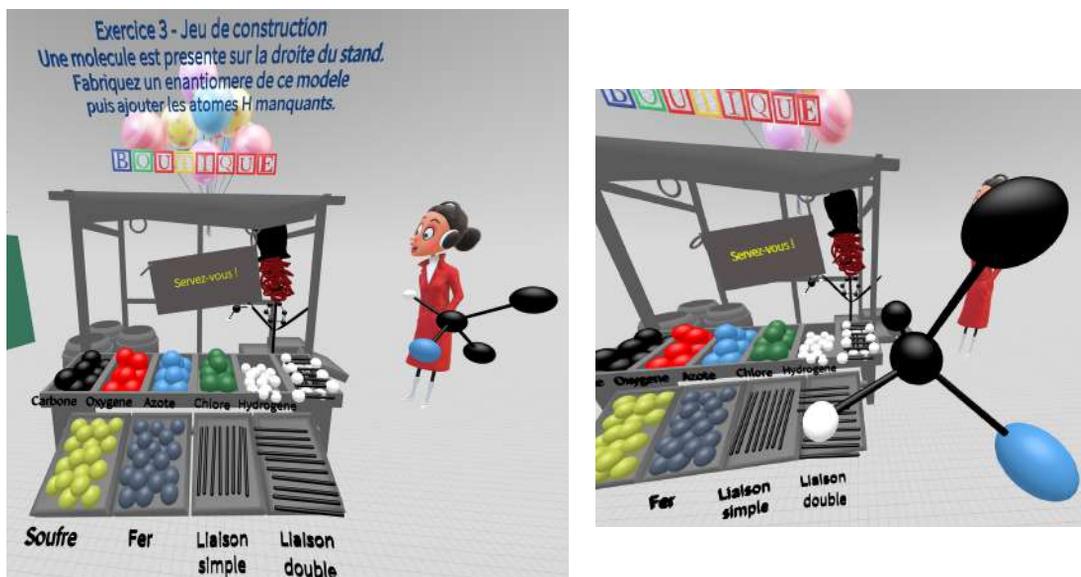


Figure 17. Boutique du Stand 3. rassemblant les éléments du jeu de construction (gauche).
Molécule modèle d'isopropylamine saisie par l'utilisateur (droite).

Sur la droite de la Figure 17 se situe le modèle d'une molécule d'isopropylamine, dont il va falloir reconstituer un énantiomère. Il faut noter que pour ne pas prolonger trop longtemps l'**action de construction**, les atomes d'hydrogène ne sont pas représentés sur cette molécule, à l'exception de celui de l'atome central, nécessaire pour repérer l'élément stéréogène de la molécule. Par ailleurs, les atomes d'hydrogène dotés de leurs liaisons simples sont déjà prêts sur la partie droite de l'étalage, et peuvent être ajoutés une fois l'exercice réussi par l'utilisateur pour avoir la molécule complète.

Afin de pouvoir réaliser l'exercice proposé, l'utilisateur est une nouvelle fois obligé de saisir la molécule modèle et de la tourner dans l'espace. Il doit ensuite piocher parmi les éléments proposés de quoi reproduire l'énantiomère demandé par l'enseignant. De plus, une fois sa construction achevée, l'utilisateur pourra alors se déporter vers la gauche de la boutique où un panneau vert sur lequel est marqué "solution" peut être déplacé (Figure 18). Derrière ce panneau se situe la molécule qu'il fallait reconstituer, et l'utilisateur peut donc directement **comparer celle-ci avec sa propre production pour vérification** (auto-évaluation).



Figure 18. L'étape finale adjacente au Stand 3.

Analyse critique : usage et potentiel

L'atelier qui a été conçu n'a pour le moment pas été déployé dans le cadre d'un enseignement de masse, mais seulement testé par différents types de public de façon individuelle (Verbatim 1), et hors séquençage pédagogique. Néanmoins, sur la base de ces premiers retours, nous pouvons d'ores et déjà mettre en relief certains avantages et inconvénients, et identifier des pistes d'amélioration du concept.

D'un point de vue pédagogique, l'atelier est déjà bien abouti, avec la mise en place de plusieurs activités (stands) permettant une **progression pédagogique** de l'utilisateur (Figure 19). Les problématiques soulevées lors de l'introduction de cet article ont été également abordées, avec notamment la création de la boutique et de l'activité "jeu de construction" qui y est associée.

D'un point de vue purement artistique, l'environnement virtuel manque encore de finitions. L'application Gravity Sketch™ permet logiquement de remédier à ce défaut, mais la prise en main de cet aspect nécessite tout de même des compétences que nous n'avons pas encore agrégées au sein de l'équipe conception.



Stand 1.

L'utilisateur est en mesure de comprendre de manière générale, la notion de chiralité et les différences que cela implique.



Stand 2.

L'utilisateur est capable d'adapter cette définition aux molécules chimiques dans leur représentation symbolique.



Stand 3.

L'utilisateur sait identifier un élément stéréogène, et reconstruire un énantiomère à partir du modèle d'une molécule donnée.

En ce qui concerne les simulations de l'aspect réel, qui contribuent largement aux aspects interactifs et immersifs, ceux-ci sont très limités. Néanmoins, leur renforcement n'est pas nécessairement une priorité. En effet, les principaux objets avec lesquels l'utilisateur est en interaction sont des molécules sous leurs formes symboliques. C'est donc plutôt sur ce dernier aspect qu'il faut nous attarder.

L'**usage du monde symbolique** dans l'atelier développé a la particularité de se manifester de façon imbriquée. En effet, le symbolisme liée à la tâche à effectuer vient se coupler au symbolisme des molécules elles-mêmes. Cela nécessite donc une double compréhension de la part de l'utilisateur :

- s'approprier le modèle moléculaire, avec la représentation géométrique des atomes et des liaisons chimiques ;
- s'approprier les indications d'affichage, notamment la surbrillance des objets sélectionnés.

Au-delà de cette particularité, l'atelier ne possède pas d'indicateurs visuels ou sonores permettant d'accentuer l'aspect interactif (Verbatim 2).

Figure 19. Progression pédagogique visée par l'atelier.

Verbatim 1.

"Notre atelier permet à des lycéens de mieux visualiser les molécules chimiques dans l'espace et de comprendre le phénomène de chiralité. Il pourrait autant servir comme support de cours complémentaire que lors d'événements autour de la découverte de la VR."

Romain Jaffré

Verbatim 2.

"Gravity Sketch™ est une bonne solution pour créer rapidement des objets simples, mais cela reste un logiciel de dessin. Il faudrait pouvoir utiliser une solution logicielle comme **Unity®** pour programmer des interactions supplémentaires (succès à un exercice, guide avatar, cinématiques)."

Baptiste Boucher

Les inconvénients soulevés dans le Verbatim 2 sont relativement importants. A l'heure actuelle, seuls quelques symboles très génériques (Figure 20) et les indications orales données par l'encadrant permettent à l'utilisateur de ne pas se sentir perdu dans l'environnement virtuel ou les actions à effectuer. Mais le renforcement de l'**aspect intuitif sera clairement un axe d'amélioration** de notre projet.

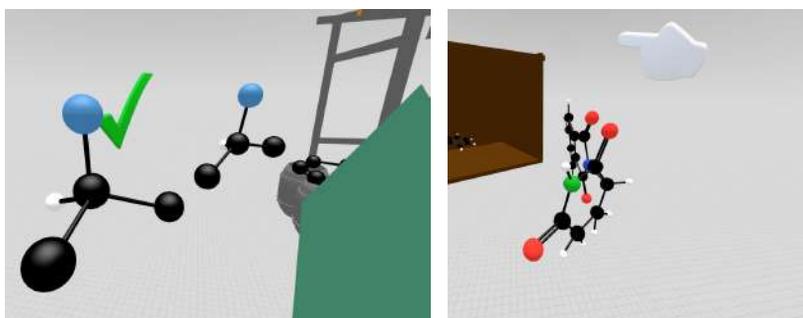


Figure 20. Exemples de symboles génériques repères pour l'utilisateur.

Gauche : coche verte indiquant la solution correcte à reproduire au Stand 3.

Droite : main indiquant le sens de parcours à l'intérieur de l'environnement virtuel.

Verbatim 3.

"Le stand du jeu de construction est vraiment l'aboutissement de ce projet. Le côté "boutique" proposé par les élèves revête un côté ludique très important. Néanmoins, Gravity Sketch™ ne permet pas de **bloquer une construction interdite** par les lois de la chimie. C'est une interaction qu'il serait très intéressant de programmer sous Unity®."

Vincent Froger

Verbatim 4.

"L'apprentissage de la chimie nécessite d'être capable de visualiser les molécules dans l'espace. En ce sens, l'atelier réalisé par les élèves est une approche intéressante pour la manipulation de molécules tridimensionnelles. Toutefois, le logiciel de dessin ne donne que peu d'informations sur la **nature des liaisons chimiques** (simples ou multiples). De plus, la règle de l'octet peut ne pas être respectée ; ainsi un élève peut dessiner plus de 4 liaisons covalentes autour d'un atome de carbone, sans pour autant être alerté par le logiciel. De la même façon, il est possible de dessiner une molécule sans respecter les angles formés par les atomes qui la composent. Il faudrait envisager une solution pour que les élèves respectent la **disposition spatiale** des atomes et donc la forme des molécules (pyramidale, trigonale plane, etc.)."

Moïse Crochet

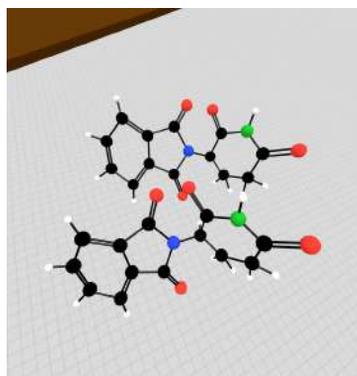
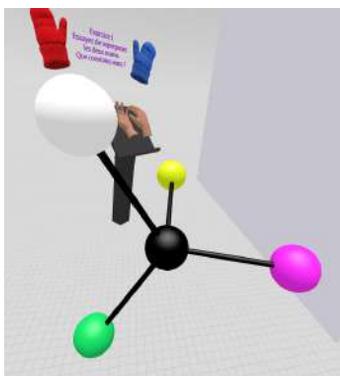


Figure 21. Manipulation des molécules du Stand 2 dans l'environnement virtuel. Gauche : molécule saisie par l'utilisateur pour comprendre l'agencement des atomes. Droite : comparaison et tentative de superposition des molécules de thalidomide.

Perspectives

Le projet "Mainmise sur la chiralité" a été initié afin de sonder directement sur le terrain, avec et auprès des élèves, l'usage pédagogique du principe de réalité virtuelle. Ce premier travail expérimental, contextualisé par un besoin très spécifique propre au domaine de la chimie, et ayant abouti à un atelier de vulgarisation scientifique des notions qui y sont liées, a surtout fait office de "Proof of concept" (POC) pour les travaux à venir.

En effet, étant donné les possibilités et les latitudes que nous pouvons prendre grâce aux avancées technologiques de ces dernières années, le développement et l'étude de l'usage de la réalité virtuelle dans les champs disciplinaires scientifiques apparaît désormais comme un axe clair d'évolution de notre pédagogie. Ce sera aussi une thématique de recherche très intéressante pour notre équipe Pédagogie Active, Approches Cognitives et Technologiques (PAACT) du laboratoire CERADE auquel nous sommes rattachés.

Plusieurs projets sont actuellement envisagés pour développer des applications logicielles directement en lien avec nos enseignements en filière Ingénieur ou en Bachelor, notamment pour y promouvoir certains aspects pratiques qui là encore sont souvent assujettis à des contraintes purement matérielles. Le développement d'une application complète sous Unity®, et l'usage des technologies actuelles, nous offrent ainsi l'opportunité de pouvoir compléter nos outils de formation, tout en nous permettant d'évaluer et de comprendre le rapport qu'ont les élèves avec ce type d'apprentissage.

Remerciements

Les auteurs de cet article tiennent à remercier chaleureusement les élèves ayant participé au développement et à la promotion de ce projet, qui s'est notamment conclue par la présentation d'un stand de démonstration lors de l'édition 2022 de la Fête de la Science. Un grand merci à Mattieu Languereau, Baptiste Boucher, Romain Jaffré, Mathis Blanstier et Alix Dufief, actuellement élèves ingénieurs en filière Informatique et Réseaux.

Les auteurs remercient également David Huon, ingénieur pédagogique au sein de l'ESAIP, pour son appui technique et son accompagnement lors des sessions d'utilisation du matériel.

Glossaire

Avatar : personnage virtuel que l'utilisateur d'un dispositif informatique obtient pour figurer graphiquement dans un environnement virtuel.

Carbone asymétrique : noté C*, il s'agit d'un atome de carbone lié à quatre autres atomes différents, le tout ayant une forme pyramidale (tétraédrique).

Cognition : la cognition regroupe les fonctions de l'esprit d'un être humain liées à l'apprentissage et à la connaissance sur son environnement. Par exemple : le langage, la mémoire, le mouvement, la décision...

Élément stéréogène : un élément stéréogène est un atome ou un groupe d'atomes qui est à l'origine d'une stéréoisomérisation, c'est-à-dire des molécules de constitution identique mais dont l'organisation spatiale des atomes est différente.

Énantiomère : les énantiomères sont des molécules images l'une de l'autre dans un miroir, et non superposables.

Formule brute : la formule brute est l'écriture la plus compacte utilisée pour décrire un composé chimique. Elle nous renseigne simplement sur la nature et le nombre d'atomes présents. On utilise généralement les formules brutes pour écrire les réactions chimiques. Par exemple, la formule brute de la molécule d'eau sera H₂O.

Formule développée plane : la formule développée plane nous renseigne sur l'agencement des atomes qui composent une molécule. Le plus souvent on représente les liaisons entre les atomes avec des angles à 90°. On précise la nature des liaisons simples ou multiples en les représentant par un ou plusieurs traits.

Lobby : anglicisme signifiant "hall" ou "vestibule". En réalité virtuelle, cela désigne un lieu virtuel, dimensionné et structuré comme le serait n'importe quel autre lieu du même type dans le monde réel.

Omniscient : en littérature, le caractère omniscient renvoie à un narrateur ayant la totale connaissance sur le scénario, les personnages et leurs pensées. Par extension, une vue omnisciente en réalité virtuelle correspond à une vision complète de l'environnement virtuel et des avatars qui s'y trouvent.

Projection de Fischer : cette projection est utilisée pour décrire les sucres et les acides aminés, qui sont alors représentés sous forme d'une croix.

Règles séquentielles CIP : les règles séquentielles de Cahn, Ingold et Prelog, dites règles de priorité CIP, constituent un ensemble de lois permettant de nommer les stéréoisomères (nomenclature).

Spéculaire : une image spéculaire est une image semblant provenir du reflet d'un miroir.

Théorie VSEPR : acronyme anglais de "Valence Shell Electron Pair Repulsion", ou théorie de Gillespie. Il s'agit d'une méthode permettant de prédire la géométrie d'une molécule à partir de la théorie régissant les répulsions au niveau de certaines particules élémentaires de la matière (électrons).

Bibliographie

Fuchs, P., Moreau, G., Coquillart, S. et Burkhardt, J-M. (2006). *Le traité de la réalité virtuelle, Volume 2*. Les presses de l'école des Mines de Paris, Sciences mathématiques et informatique. ISBN 978-2911762635.

Arnaldi, B., Fuchs, P. et Tisseau, J. (2003). *Le traité de la réalité virtuelle, Volume 1*. Les presses de l'école des Mines de Paris, Sciences mathématiques et informatique. ISBN 978-2911762635.

Fuchs, P., Nashashibi, F. et Lourdeaux, D. (1999). A theoretical approach of the design and evaluation of a virtual reality device. *Virtual Reality and Prototyping'99*, 11-20. Laval, France.

Radianti J., Majchrzak T.A., Fromm J. et Wohlgenannt I. (2020). A systematic review of immersive virtual reality applications for higher education: design elements, lessons learned, and research agenda. *Computers and Education*, 147, 103778.
<https://doi.org/10.1016/j.compedu.2019.103778>

Conservatoire National des Arts et Métiers. (2022). Quand la réalité virtuelle s'invite en cours de chimie. Projet Cap'VR. <https://www.cnam.fr/quand-la-realite-virtuelle-s-invite-en-cours-de-chimie-1315427.kjsp?RH=actuformation>

Astuti, T.N., Sugiyarto, K.H. et Ikhsan, J. (2020). Effect of 3D Visualization on Students' Critical Thinking Skills and Scientific Attitude in Chemistry. *International Journal of Instruction*, Vol.13, No.1, 151-164.

<https://doi.org/10.29333/iji.2020.13110a>

George-Williams, S., Pullen, R. et Schmid, S. (2020). Virtual Reality, help or hindrance? A case study of two undergraduate student-generated chemistry lessons. *International Journal of Innovation in Science and Mathematics Education*, 28(2), 16-27.

<https://doi.org/10.30722/IJISME.28.02.002>

Parrot, F. (2022). Liaisons: sauvetage chimique. Une application de réalité virtuelle pour l'enseignement de la chimie. <https://eductive.ca/ressource/recits/liaisons-sauvetage-chimique-une-application-de-realite-virtuelle-pour-lenseignement-de-la-chimie/>

Mouneyrou, P., Ferreira, A. et Inquel, C. (2019). Mécanique naval et réalité virtuelle : outils et méthodes favorisant la coopération. *Questions de Pédagogies dans l'Enseignement Supérieur*, ENSTA Bretagne, IMT-A, UBO, Brest, France
hal-02284041

Weber, M-L., Rodhain, F. et Chollet, A. (2018). Usage de la réalité virtuelle en enseignement supérieur: de la posture à la compétence. Une réflexion par la didactique professionnelle. AIM XXIII^{ème} colloque, Montréal, Canada.

Chelain, E., Lubin-Germain, N. et Uziel, J. (2021). *Chimie organique*. s.l. : Dunod. ISBN 978-2-10-081544-9.

Grécias, P. et Migeon, J-P. (2009). *Chimie 1ère année BCPST-Véto. 2e*. s.l. : Tec & Doc Lavoisier. ISBN 978-2743011314.

Perrio, S., Roy, B. et Winum, J-Y. (2017). *Chimie*. s.l. : Dunod. ISBN 978-2-10-074831-0.

Rouquérol, F. et al. (2016). *Les cours de Paul Arnaud - Chimie générale. 8e*. s.l. : Dunod. ISBN 978-2-10-074367-4.