



**UMR 5180 des Sciences Analytiques Université Claude Bernard Lyon1-CNRS  
Institut des Sciences Analytiques - ISA- FR 2112**

Direction : Pierre LANTERI

Directeur-Adjoint : Jean-Louis ROCCA

Assistante de direction : Marie-Hélène Boutran-Lara

Effectifs au **01/01/2007** :

43 permanents (20 EC, 8 C, 15 ITA/ITARF) / 40 stagiaires (dont 25 doctorants)



**Equipe CHEMOD**  
Chimométrie/  
Modélisation chimie théorique

*Lantéri Pierre, PR*  
*Chermette Henry, PR*  
*Bordes Claire MC*  
*Gauvrit Jean-Yves (AI)*  
*Lamiraix Amélie (AI)*

**Equipe ANABIO**  
RMN Biomoléculaire  
Spectro de masse

**Equipe SEPSYS**  
Séparations/microsystèmes

**Equipe SPEC 2**  
Spectroscopie/Spéciation

**Equipe THERMALI**  
Thermodynamique/  
Analyse en ligne

## CHEMOD

- Développements fondamentaux en théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT),
- Applications de la DFT orientées vers les méthodes de chimie analytique
- Interactions entre la peroxyredoxine et l'eau oxygénée : en lien avec les études en RMN, menées par O. Walker, approche QM/MM
- DFT et Chimiométrie

## CHEMOD

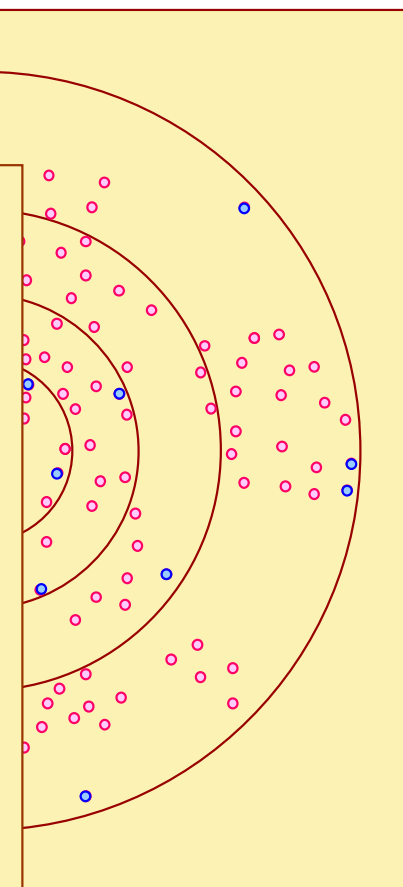
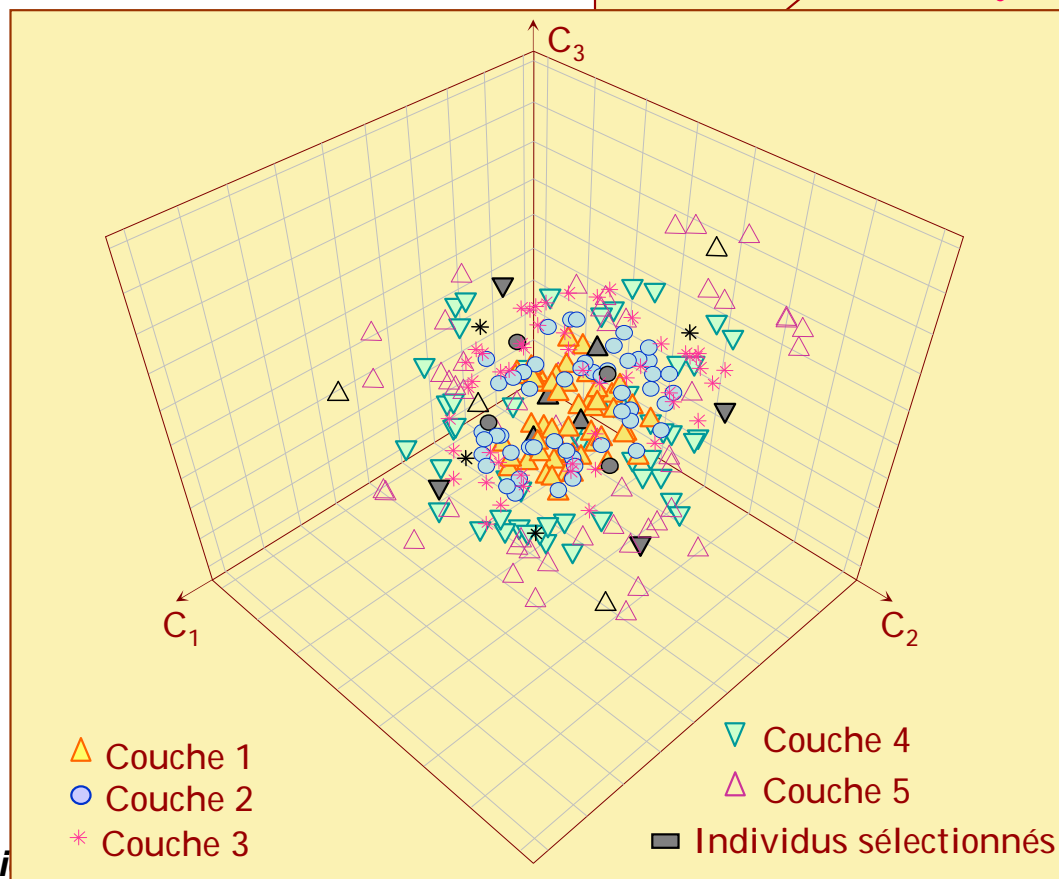
- Modélisation de propriétés physico-chimiques /Analyse de données
  - Caractérisations physicochimiques; Naturalité et analyses des traces et ultra-traces de contaminants.
  - Contribution à l'évaluation des données, voies d'exposition et protocoles par des méthodes statistiques des produits et substances visées par REACH
  - Analyse et traitement des données spectrales
  - Etude in silico de banque de données de molécules à visée thérapeutiques. Réduction de chimiothèque et modélisation de propriétés physicochimiques

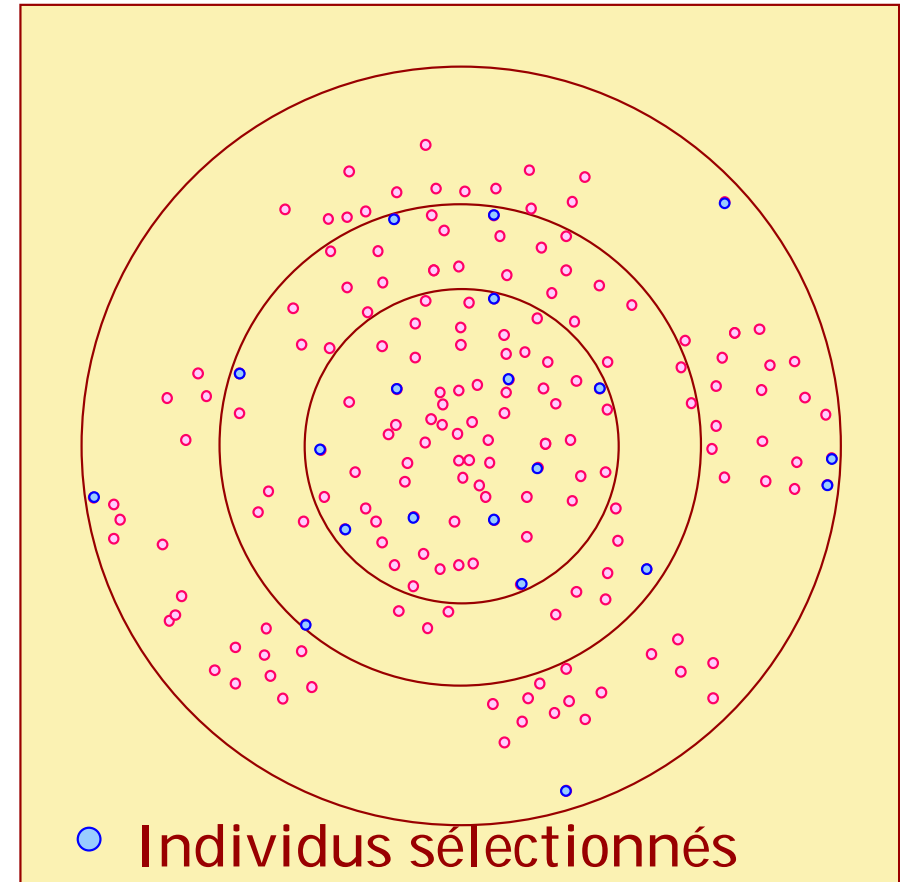
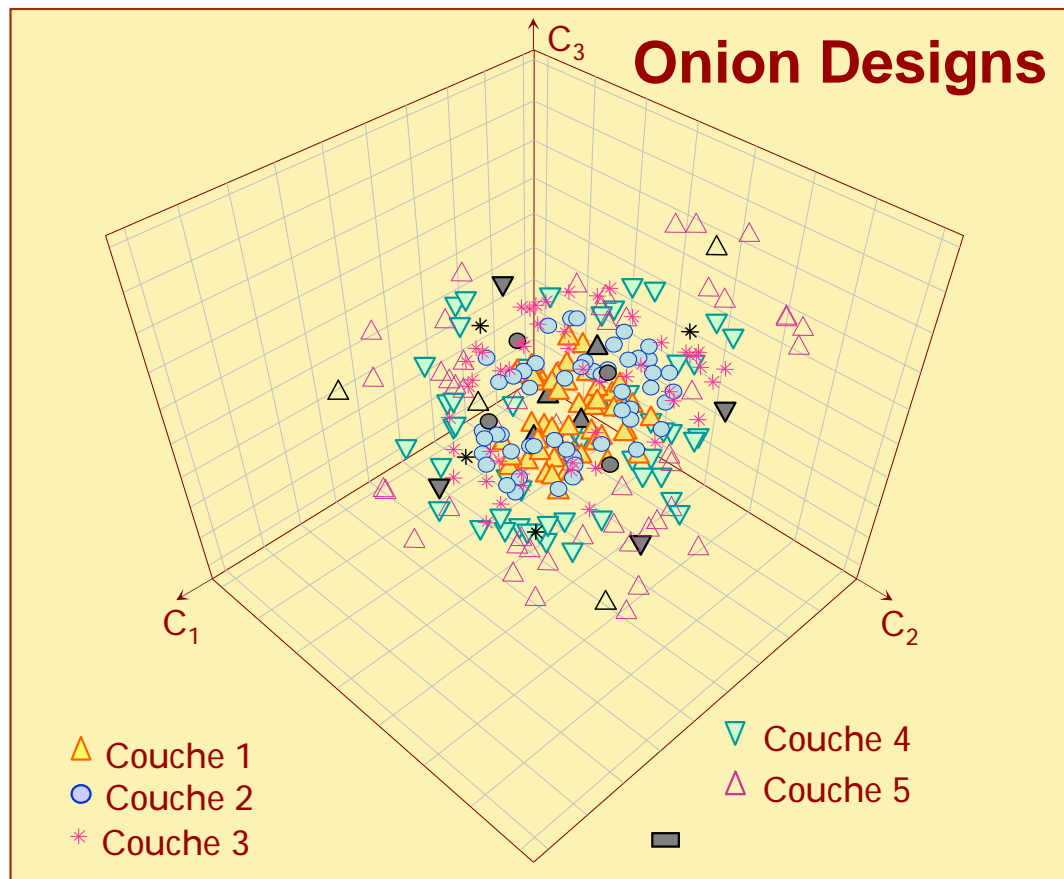
1. *Réduction de chimiothèque*
2. *Préparation des bases de données*
3. *Analyse des bases de données*
4. *Techniques de réduction*



1. Principe de réduction d'une chimiothèque
2. Préparation des bases de données
3. Analyse des bases de données
4. Techniques de réduction

## Les "onion designs"









# Chimiométrie 2007

## 1997-2007 : 10 ans de Chimiométrie

**Université Claude Bernard Lyon 1 –  
Ecole de Chimie Physique Electronique de Lyon**

Ce congrès fera le point sur 10 ans de Chimiométrie : les avancées de la Chimiométrie, de la collecte de l'information (plans d'expériences) au traitement des données (analyse des données / modélisation).