

L'Informatique Chimique (IC)

à Reims

Jean-Marc Nuzillard

`jm.nuzillard@univ-reims.fr`

Institut de Chimie Moléculaire
Reims (ICMR)

Les Thématiques de l'ICMR (2008)

- Chimie des substances naturelles
- Synthèse de substances biologiquement actives
- Méthodologie de la synthèse organique
- Coordination/Complexation
- Polymères

- La valorisation non alimentaire des productions agricoles constitue une thématique transversale, en relation avec le Pôle de Compétitivité "Agro-Industries".

Les chercheurs proches de l'IC

- Jean-Marc Nuzillard, DR CNRS, Chimie structurale.
- Eric Hénon, MCU, Chimie quantique.
- Ex-équipe de modélisation moléculaire des systèmes biologiques... 1 PR et 1 MCU dispersés dans l'IFR 53 "Biomolécules – Biomatériaux".

Thématiques

- Analyse structurale organique automatique
 - Le logiciel **LSD**
- Traitement de données de RMN
 - Analyse de multiplets : **AUJ**
 - Utilisation de la prédiction linéaire : **ALPESTRE**
- Simulation chromatographique
 - Chromatographie de Partage Centrifuge : **CPCSim**
- Analyse rétrosynthétique
 - Le logiciel **Quiral**
- www.univ-reims.fr/LSD/JmnSoft

Le logiciel LSD

- LSD : Logic for Structure Determination.
- Données issues des spectres ^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC.
- Informations sur la multiplicité et l'hybridation.
- Contraintes de voisinages liées aux déplacements chimiques ou aux couplages.
- Inclusion/Exclusion de sous-structures.
- Implémentation : C et Tcl/Tk

Le logiciel LSD

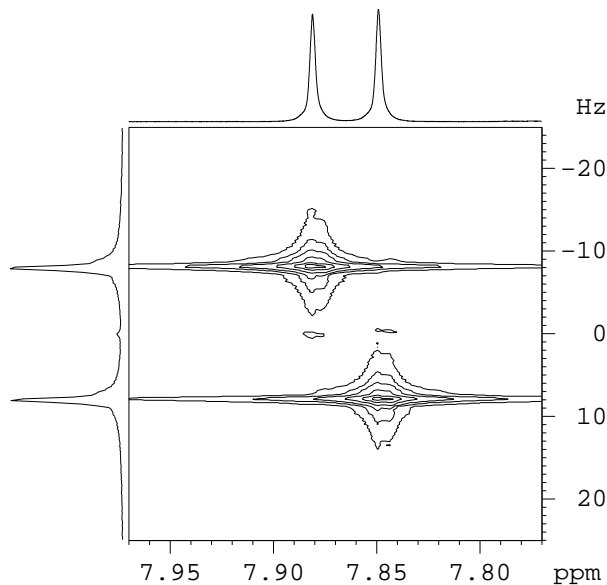
- Codage des données sous forme textuelle.
- Détermination de toutes les structures planes compatibles avec les données.
- Génération automatique des dessins 2D des molécules.
- Evaluation critique du résultat.
- Modification des données pour un nouveau cycle de résolution.
- Encore trop de rigidités dans la définition d'un problème.
- Manque d'une interface d'entrée décente.
- Améliorations possibles des dessins 2D des solutions.
- Lien avec une base de données en projet.

Analyse automatique de multiplets

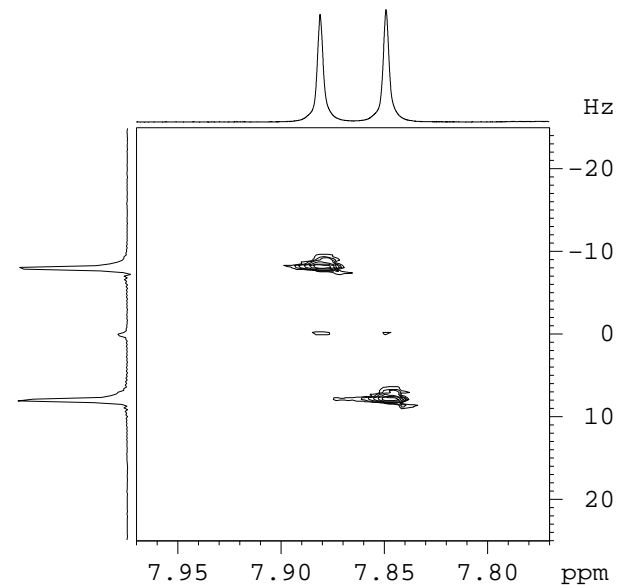
- Analyse au premier ordre des spectres de RMN ^1H .
- Implémentation : C et Gifa (M.-A. Delsuc, Montpellier).
- La liaison avec NMRnotebook (NMRtec) est en cours.
- Des améliorations de l'algorithme sont encore possibles.

Prédiction linéaire en RMN

- Pour les spectres J -résolus / SERF en absorption pure.
- Implémentation : Octave (clone de Matlab).
- L'utilisation en routine est encore difficile : intégration avec Topspin/Xwinnmr et NMRnotebook envisagée.



Magnitude



Double absorption

Chromatographie

- Ambitions extrêmement limitées.
- Simulation de la série d'équilibres chimiques qui se produisent en chromatographie de partage liquide-liquide en mode "échange d'ions".
- But : évaluer l'influence des paramètres expérimentaux (constantes thermodynamiques, concentrations des espèces) sur la qualité des séparations.
- La résolution des systèmes équations polynomiales utilise une méthodes itérative ou la librairie SYNAPS développée à l'INRIA.
- Implémentation : C++.
- Thèse A. Maciuk, dirigée par J.-H. Renault.

Analyse rétrosynthétique

- Ambitions extrêmement limitées.
- Identification des aldo-hexoses et des aldo-pentoses (Q-Targets) qui correspondent à un ensemble contigu, linéaire ou cyclique de carbones asymétriques de type "sucre".
- Recherche de précurseurs pour les Q-Targets difficiles d'accès (chers).
- Dessin dans Chem3D, enregistrement a format .mol dans Chemdraw.
- Implémentation : Perl/Tk.
- Résultat immédiat...

Réflexions et questions finales

- Réalisation de maquettes destinées à valider des preuves de concept.
- Les logiciels sont disponibles sur le web sous licences libres (GPL, CeCILL ou BSD-like).
- Peu d'intérêt éveillé par les réalisations actuelles, ni dans le secteur académique, ni dans le secteur privé.
- Quelques utilisateurs du logiciel LSD.
- Faut-il un produit "fini" pour susciter l'intérêt pour une application ?
- Peut-on fabriquer un produit "fini" si on ne sent pas d'intérêt pour l'application ?

Merci de votre attention !!...