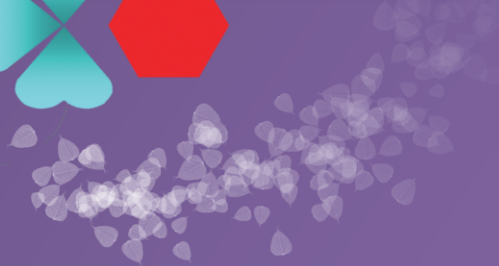


2017

L-g-Chimio V1.4



Laurent ROBIN

laurent.robin@univ-orleans.fr

14/11/2017

I. Manuel d'utilisation	1
A. Connexion	1
1. Connexion à l'application	1
2. Mot de passe perdu.....	2
B. Saisie d'un nouveau produit	4
1. Première page de saisie.....	4
2. deuxième page de saisie.....	7
C. Modification et consultation des données	9
1. Effectuer une recherche	9
2. Résultat de la recherche	12
3. Consulter une fiche.....	14
a) Onglet « Structure »	14
b) Onglet « Analyses »	15
c) Onglet « Résultats Bio »	16
d) Onglet « Historique »	18
4. Modifier une fiche	19
D. Rechercher sur l'ensemble des données libres et brevetés	20
E. Consultation des résultats des tests biologiques	21
F. Paramètres de son compte	21
G. FAQ	22
II. Annexes	23
A. Recommandations pour la normalisation de structures de la CN	23

I. MANUEL D'UTILISATION

A. CONNEXION

1. CONNEXION A L'APPLICATION

La connexion d'un utilisateur à l'application s'effectue par le menu de gauche (*voir encadré rouge Image 1*) en entrant son **nom d'utilisateur** et son **mot de passe** envoyé automatiquement par courriel lors de la création de l'utilisateur par l'administrateur/chimiothécaire. Puis, cliquez sur connexion. Si vous êtes correctement authentifié, vous arrivez sur la page d'accueil de la chimiothèque de votre laboratoire (*Image 2*). Sinon, vous retournez à l'authentification, avec la possibilité de redemander un mot de passe (*Image 3*) qui vous sera envoyé par courriel.

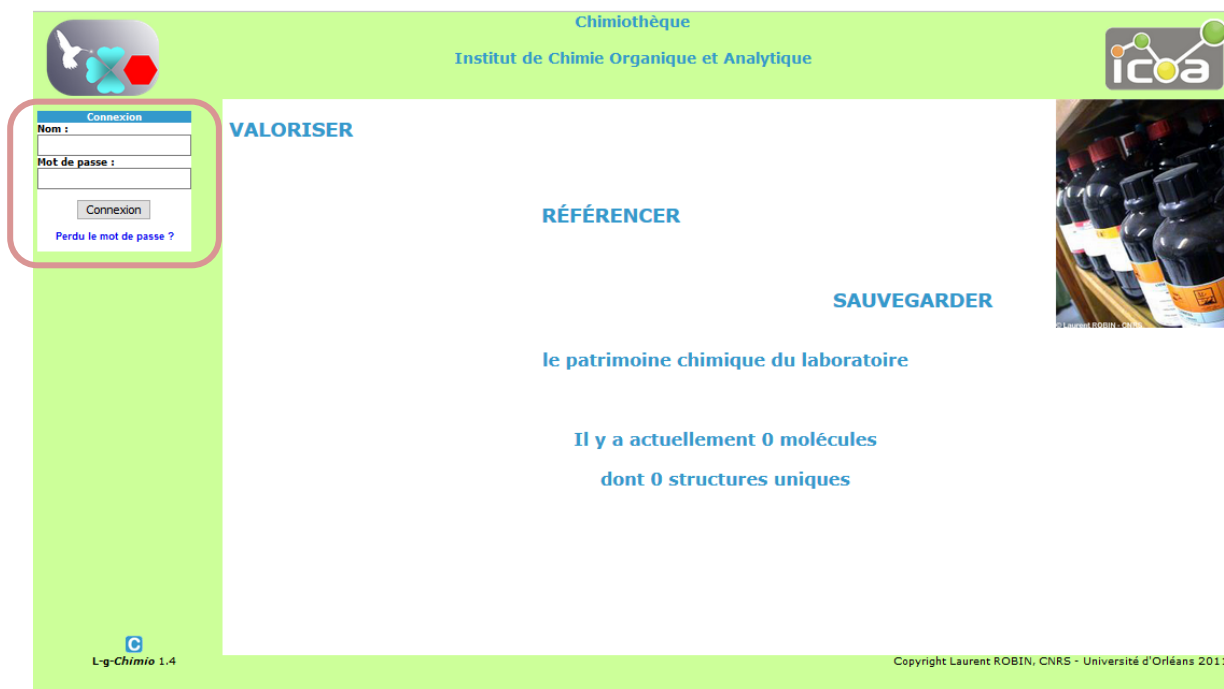


Image 1 : Connexion à l'application

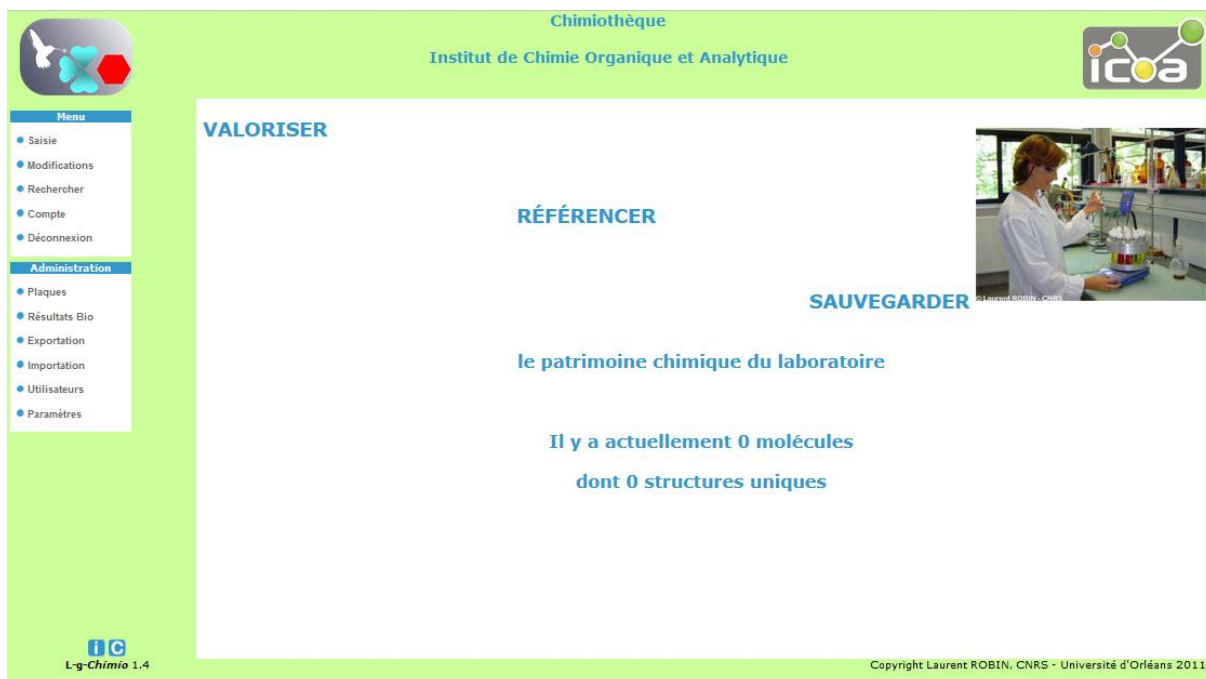


Image 2 : Authentification de l'utilisateur chimiothécaire/administrateur réussie

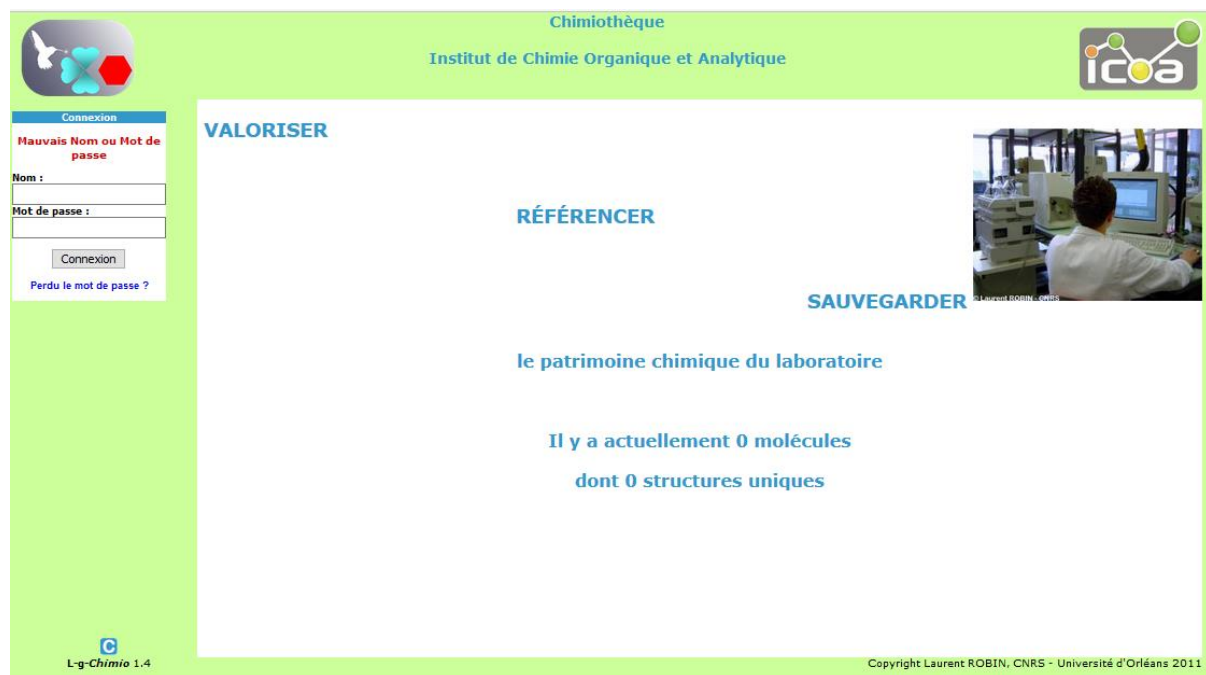
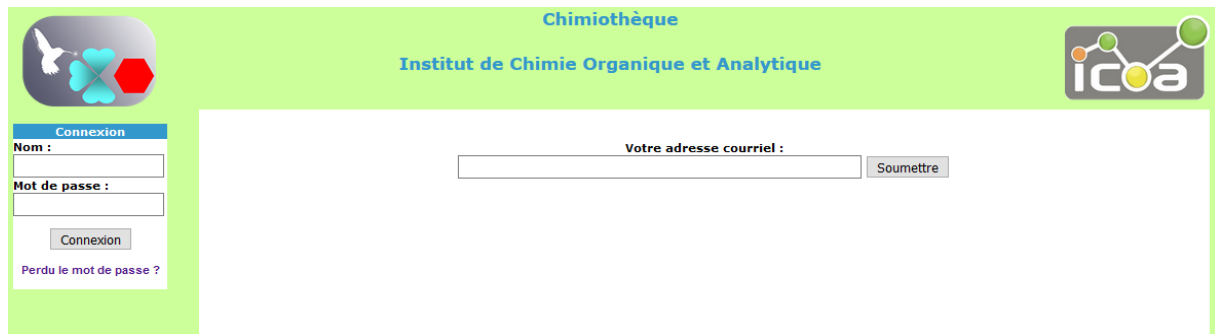


Image 3 : Erreur durant l'authentification de l'utilisateur

2. MOT DE PASSE PERDU

Si vous avez perdu votre mot de passe, vous pouvez en obtenir un nouveau automatiquement. En bas du menu de connexion, vous cliquez sur le lien « Perdu le mot de passe ? » vous arrivez sur une page (Image 4) où il vous suffit de renseigner votre adresse courriel et de soumettre,

pour recevoir un nouveau mot de passe. **Attention, l'adresse courriel renseignée doit correspondre à celle connue pour le compte correspondant.**



Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Connexion

Nom :

Mot de passe :

Connexion

[Perdu le mot de passe ?](#)

Votre adresse courriel : Soumettre

Image 4 : Page pour obtenir un nouveau mot de passe automatiquement

B. SAISIE D'UN NOUVEAU PRODUIT

1. PREMIERE PAGE DE SAISIE

Dans la section saisie du Menu, vous arrivez sur la saisie d'un nouveau produit ([Image 5](#)), cette section est accessible à tous. Il existe une différence pour l'administrateur et le chef qui vont devoir choisir une équipe pour rattacher leur saisie. Tous les champs marqués avec une * doivent être obligatoirement renseignés pour pouvoir continuer.

The screenshot shows the 'Saisie d'un nouveau produit' interface. On the left is a 'Menu' with options like 'Saisie', 'Modifications', 'Rechercher', 'Compte', 'Déconnexion', and 'Administration'. The main area contains a 'JSME Molecular Editor' and a 'Note sur la configuration' field. On the right, there are several mandatory fields marked with an asterisk (*):

- * Equipe --- Responsable : -- Sélectionnez le couple équipe --- responsable -- (highlighted with a red box and callout)
- * Origine de la molécule : synthèse
- * Etape de synthèse de la molécule : -- Sélectionnez une étape --
- * Masse de produit disponible : [] mg
- * Type de structure : Libre

A 'Soumettre' button is located at the bottom right. The footer includes 'L-g-Chimio 1.4' and 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 5 : Saisie d'une nouvelle molécule

Sous celle-ci, vous avez un lien vers un fichier PDF contenant les recommandations de la Chimiothèque Nationale. Concernant le dessin des structures moléculaires. Vous pouvez également retrouver ce document en Annexe 1.

Vous pouvez importer directement votre structure moléculaire dans JSME ©Novartis Institutes for BioMedical Research Inc. and Bruno Bienfait à partir d'un fichier de type mol ou d'un smile. Par exemple à partir du logiciel Biovia Draw © Dassault Systemes, une fois votre molécule dessinée ou ouverte dans le logiciel cliquez dans le menu « Edit » puis sur « Copy As » puis cliquez sur « Molfile » ([Image 6](#)).

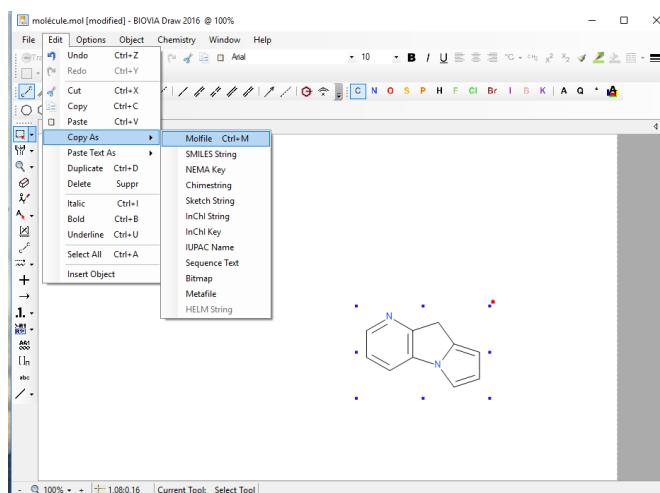



Image 6 : copier au format Mol votre structure à partir d'un logiciel de dessin de structure

Dans L-g-Chimio vous cliquez sur l'icône  cliquez ensuite sur « Paste MOL or SDF or SMILES » dans cette nouvelle fenêtre collez (Ctrl V) votre texte (Mol ou Smiles) issu de votre logiciel de dessin de structure puis cliquez sur le bouton « Accept » (Image 7).

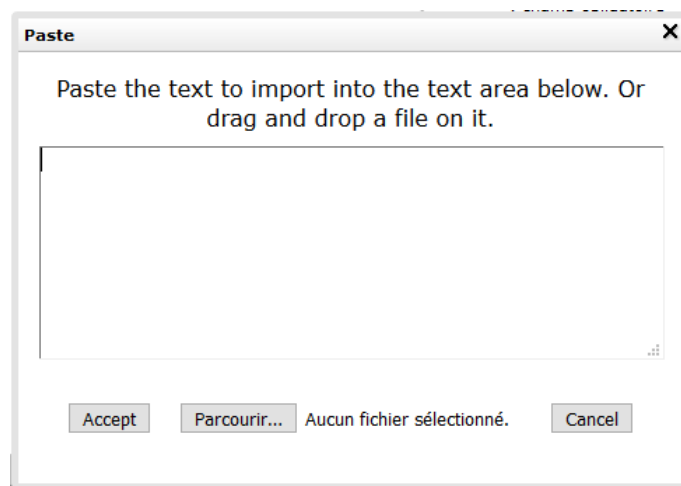


Image 7 : fenêtre de JSME ou coller votre texte au format Mol ou Smiles

Le champ « Note sur la configuration » permet d'écrire un détail non visible sur le dessin de la structure, par exemple : mélange d'énantiomères.



Attention, il est très important de prendre soin de bien dessiner votre structure moléculaire. car c'est l'élément central du système.

Une fois la molécule correctement dessinée, vous devez renseigner la masse en mg ou en nmol de produit mis en pilulier. L'unité nmol est utilisée pour la chimiothèque Européenne des Glycomimétiques.

Elle peut être de 0mg. Le produit est entré pour mémoire (*le produit reste un savoir-faire du laboratoire*), il est donc disponible pour être criblé virtuellement.

Ensuite, vous devez renseigner le type de la molécule à savoir si elle est :

- **Libre de droits** : la molécule est exportable au niveau de la Chimiothèque nationale,
- **Sous contrat** : la molécule est visible par l'utilisateur qui l'a entré, par son responsable, par son chef et par l'administrateur,
- **Breveté** : la molécule est visible par tous. Vous aurez un champ supplémentaire permettant de renseigner le numéro du brevet sur la deuxième page.

Le champ « origine de la molécule » contient une valeur par défaut pour l'ensemble des utilisateurs, si elle a été définie dans la section « Paramètres » (voir Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), vous devez sélectionner une autre valeur si celle par défaut ne convient pas à votre laboratoire.

Une fois les champs renseignés correctement, cliquez sur le bouton « Soumettre » pour passer à la page suivante. Exemple de saisie voir [Image 8](#).

The screenshot displays the L-g-Chimio 1.4 interface. On the left is a navigation menu with categories like 'Saisie', 'Modifications', 'Rechercher', 'Compte', 'Déconnexion', and 'Administration'. The central area features a chemical structure drawing tool with a toolbar and a list of elements (C, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, X). A chemical structure of a substituted benzene ring with a methoxy group and a long chain ending in a pyrrole ring is shown. To the right, a form contains several fields:

- * Equipe --- Responsable : Chenault --- Jacques Chenault (highlighted with a red box and callout)
- * Origine de la molécule : synthèse
- * Etape de synthèse de la molécule : molécule finale
- * Masse de produit disponible : 9 mg
- * Type de structure : Libre

 A 'Soumettre' button is located at the bottom right of the form area. The footer includes 'L-g-Chimio 1.4' and 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

[Image 8](#) : Exemple de saisie

2. DEUXIEME PAGE DE SAISIE.

Si vous avez mis la numérotation en automatique (Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), le numéro apparaît en rouge en haut au milieu. Vous trouverez un exemple de la deuxième page de saisie dans la chimiothèque à l'Image 9


A ce stade, vous pouvez encore modifier la masse. Si elle est en dessous du seuil adopté dans la section paramétrage (Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), (*dans notre exemple 5mg*), le numéro est modifié automatiquement lorsque votre curseur change de champ. Dans cet exemple, on a choisi en première page de renseigner la masse à 5mg. J'obtiens le numéro ICOA-FST-L-01A02. Si l'on augmente cette masse dans la page N°2, le numéro n'est pas modifié. Par contre, si l'on diminue en dessous du seuil des 5 mg défini dans le paramétrage (Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), le numéro est automatiquement modifié et devient ICOA-FST-L-1, représentant un numéro de produit non stocké. **Un numéro proposé dans la page N°2 de la saisie est réservé pour la journée, même si l'utilisateur ne va pas au bout de sa saisie ou s'il modifie la masse entraînant un changement de numéro. Ce numéro sera reproposé à partir du lendemain.**

De même, si un produit est épuisé (0mg), cela entraîne un changement de numéro automatique lorsque l'utilisateur effectue le changement de masse. Le numéro ainsi libéré sera automatiquement proposé à la prochaine entrée, effectuée par un utilisateur. Pour chaque entrée dans l'application, il y a **un numéro unique permanent aléatoire à 8 chiffres** qui est généré. Ce numéro visible dans la fiche du produit peut être utilisé pour le transfert des données et le dialogue avec la Chimiothèque Nationale ou les biologistes. Ainsi chaque produit possède un numéro unique invariant à 8 chiffres et un numéro de stockage en fonction du paramétrage défini au chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**


Pour les analyses, vous pouvez dans le cadre blanc entrer les résultats d'analyses sous forme de texte et/ou entrer via le bouton « Parcourir » le fichier du spectre. Il n'y a pas de blocage sur le type de fichier. Néanmoins, on vous recommande d'utiliser un format pérenne de type « PDF » et pas trop volumineux, car il est stocké dans la base de données.

Astuce :

Dans le champ « Précaution » à prendre, la sélection ou désélection d'une entrée peut se faire grâce à la touche Alt Gr de votre clavier + clique droit de la souris.



Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique



* : champ obligatoire

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion
- Administration**
- Plaques
- Résultats Bio
- Exportation
- Importation
- Utilisateurs
- Paramètres

Code(s)-barre(s) ou Qrcode(s) :
(séparés par un retour à la ligne)

*** Masse de produit disponible :**
9 mg

*** Couleur du produit :**
-- Sélectionnez une couleur --

*** Type de purification :**
-- Sélectionnez une purification --

*** Aspect :**
-- Sélectionnez l'aspect --

Précautions à prendre

stocker sous argon
se dégrade
solide électrostatique

*** Référence cahier de laboratoire ou thèse :**

*** Solvants de solubilisation :**

- acétate d'éthyle
- acétone
- acétonitrile
- benzène
- chloroforme
- dichlorométhane
- DMF
- DMSO
- eau
- éthanol
- éther éthylique
- éther de pétrole
- inconnue
- insoluble
- méthanol
- pyridine
- THF
- toluène

*** Nom en nomenclature IUPAC (anglaise) :**

Mode opératoire :

Analyses

Analyse élémentaire :

Point de fusion :

 °C

Point d'ébullition

Point d'ébullition :

 °C

A pression de :

 atm

Pureté de la substance

Pureté mesurée : %

Méthode de mesure de la pureté :

Spectrométrie de Masse

SM :

Source d'ionisation :

-- Sélectionnez la source --

Fichier du spectre SM :

Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

Spectrométrie de Masse haute résolution

HRMS :

Source d'ionisation :

-- Sélectionnez la source --

Fichier du spectre HRMS :

Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

spectrométrie UV

UV :

Fichier du spectre UV :

Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

spectrométrie Infrarouge

IR :

Fichier du spectre IR :

Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

mesure de l' α_D

α_D

Température :

 °C

Concentration :

 mol. L⁻¹

Solvant :

-- Sélectionnez le solvant : --

CCM :

Rf :

Solvants utilisés :

<https://cn-intra.enscm.fr/chidept.html>

Page 8

The screenshot shows a web form with a light green sidebar on the left containing the 'iC' logo and 'L-g-Chimio 1.4'. The main content area is divided into several sections:

- Spectrométrie**: A large empty text area for 'Données RMN ¹H :'. Below it is a 'Fichier du spectre RMN ¹H :' section with a 'Parcourir...' button and the text 'Aucun fichier sélectionné.'
- Spectrométrie RMN ¹³C**: A large empty text area for 'Données RMN ¹³C :'. Below it is a 'Fichier du spectre RMN ¹³C :' section with a 'Parcourir...' button and the text 'Aucun fichier sélectionné.'
- Bibliographie**: A section titled 'Publication' containing three input fields: 'numéro DOI :', 'numéro HAL :', and 'Référence CAS :'. Below this is a 'Soumettre' button.
- Observations**: A large empty text area for 'Observations :'. Below this is a 'Soumettre' button.

At the bottom right of the form, there is a 'Soumettre' button. The footer of the page reads 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 9 : Exemple de saisie

Toutes les informations renseignées, cliquez sur « Soumettre ». **À ce moment-là, seulement les informations sont sauvegardées dans la base de données.** Un courriel automatique est envoyé au responsable, au chef et à l'administrateur. Une option dans la section « Compte » permet de désactiver par chacun ce retour par courriel voir chapitre I.F.

C. MODIFICATION ET CONSULTATION DES DONNEES

La section « Modification » du « Menu » gauche permet à l'utilisateur de consulter et de modifier leurs molécules, pour les responsables ou chefs, celles de leur équipe. L'administrateur peut intervenir sur l'ensemble des fiches.

1. EFFECTUER UNE RECHERCHE

La page d'accueil de cette section permet à l'utilisateur d'effectuer une recherche selon divers critères.

Tout le monde, peut effectuer une recherche par structure exacte, par sous structure, par similarité, par masse molaire, formule brute, référence cahier de laboratoire/thèse et numérotation. Pour ce dernier, vous pouvez utiliser :

- soit le numéro unique aléatoire à 8 chiffres,
- soit le numéro défini dans la section « paramètres-produit » (exemple : ICOA-FST-L-01A02 voir Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**),

- soit le numéro de la Chimiothèque Nationale (CN000000V) s'il a été importé par l'administrateur (Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**).

En ce qui concerne la masse molaire et la formule brute, vous pouvez effectuer une recherche exacte en cochant la case « exacte ». Sinon par défaut, vous effectuez une recherche par motif.

La partie supérieure de la page est modifiée en fonction de l'utilisateur (*chimiste, responsable, chef et administrateur* (**Erreur ! Source du renvoi introuvable.**))

Le chimiste (Image 10) verra le champ « type de molécule » (*libre, sous contrat ou breveté*), le responsable (Image 11) verra le champ « type de molécule » et « collaborateurs » (*avec seulement les membres de son équipe*), le responsable (Image 12) verra « équipes » (*avec son ou ses équipes rattachées*).

L'administrateur aura tous les menus avec l'ensemble des équipes et des utilisateurs.

Pour la recherche par structure exacte, sous structure ou similarité vous devez dessiner votre structure dans JSME ©Novartis Institutes for BioMedical Research Inc. and Bruno Bienfait puis cliquer sur le type de recherche souhaité. Pour la recherche par similarité vous pouvez ajuster le coefficient de Tanimoto grâce au taquet. Plus celui-ci est proche de zéro et plus votre recherche sera similaire.

The screenshot displays the L-g-Chimio 1.4 web interface. At the top, it says 'Chimiothèque Institut de Chimie Organique et Analytique'. On the left is a 'Menu' with options: Saisie, Modifications, Rechercher, Compte, Déconnexion. The main search area has a dropdown for 'type de molécule : -- Sélectionnez le type --' and a 'Rechercher' button. Below this is a JSME Molecular Editor window. To the right of the editor are input fields for 'Masse molaire en g.mol⁻¹', 'Formule brute', 'Numérotation', and 'Référence cahier de laboratoire ou thèse', each with an 'exacte' checkbox. At the bottom, there are radio buttons for search types: 'Structure exacte' (selected), 'Sous structure', and 'Similarité', followed by a slider for 'Coefficient de similarité : min 0' to 'max 1 valeur: 0,6'. A 'Rechercher' button is at the bottom right. Two callout boxes are present: a purple one pointing to the 'type de molécule' dropdown labeled 'Partie propre à chaque type d'utilisateur', and a red one pointing to the search options and JSME editor area labeled 'Partie commune'.

Image 10 : Affichage vu par le type chimiste

The screenshot shows the 'Chimiothèque' interface for the 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. The header includes the logo and the text 'Chimiothèque Institut de Chimie Organique et Analytique'. On the left, a 'Menu' sidebar lists options: Saisie, Modifications, Résultats Bio, Rechercher, Compte, and Déconnexion. The main search area features a 'type de molécule' dropdown (set to '-- Sélectionnez le type --'), an 'et/ou' separator, and a 'collaborateurs' dropdown (set to '-- Sélectionnez un collaborateur --'). A 'Rechercher' button is present. Below this is a JSME Molecular Editor window with a toolbar and a vertical element list (C, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, X). To the right of the editor are input fields for 'Masse molaire en g.mol⁻¹' (with an 'exacte' checkbox), 'Formule brute' (with an 'exacte' checkbox), 'Numérotation' (with a help icon), and 'Référence cahier de laboratoire ou thèse'. At the bottom, a search filter section shows 'Rechercher par' with radio buttons for 'Structure exacte' (selected), 'Sous structure', and 'Similarité', followed by a slider for 'Coefficient de similarité' (min 0, max 1 valeur: 0,6) and another 'Rechercher' button. The footer contains 'L-g-Chimio 1.4' and 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 11 : Affichage vu par le type responsable

The screenshot shows the 'Chimiothèque' interface for the 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. The header is identical to Image 11. The 'Menu' sidebar is expanded to include an 'Administration' section with sub-options: Plaques, Résultats Bio, Exportation, Importation, Utilisateurs, and Paramètres. The main search area features a 'type de molécule' dropdown (set to '-- Sélectionnez le type --'), an 'et/ou' separator, and two dropdowns: 'équipes' (set to '-- Sélectionnez une équipe --') and 'collaborateurs' (set to '-- Sélectionnez un collaborateur --'). A 'Rechercher' button is present. Below this is the same JSME Molecular Editor window. To the right are the same input fields for 'Masse molaire en g.mol⁻¹', 'Formule brute', 'Numérotation', and 'Référence cahier de laboratoire ou thèse'. At the bottom, the 'Rechercher par' section is identical to Image 11. The footer contains 'L-g-Chimio 1.4' and 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 12 : Affichage vu par le type chef

Grâce à ce formulaire, l'utilisateur peut accéder en recherche, modification et consultation qu'aux seuls produits qu'ils lui sont rattachés par la hiérarchie des droits

(Erreur ! Source du renvoi introuvable.). Seul l'administrateur aura une vue sur l'ensemble des équipes définies dans la section Erreur ! Source du renvoi introuvable..

2. RESULTAT DE LA RECHERCHE

Après avoir inscrit un critère de recherche et cliquez sur « Rechercher » dans la section concernée, vous obtenez un résultat qui s'affiche page par page avec 8 molécules par page (Image 13).

The screenshot displays the 'Chimiothèque' interface from the Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA). The page shows search results for 202 entries, displayed in 26 pages. The current view is page 1, showing 8 molecules. Each molecule entry includes a chemical structure, its molecular formula, molar mass, and a brief description of the compound and its responsible researcher.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Il y a 202 réponse(s) répartie(s) sur 26 page(s) page 1 page 2 Aller à la page

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Changement de pages

Structure	Formulaire	Formule	Poids moléculaire	Description
<chem>O=C(CC1=CC=CC=C1)O</chem>	ICOA-IGU-L-02H04 : 10mg GIGANT Nicolas 20-10-2011 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_9H_{10}O_3$	166.062994186 g.mol ⁻¹	
<chem>O=C/C=C/C1=CC=C(C=C1)S(=O)(=O)N1CCCC1</chem>	ICOA-IGU-L-04A02 : 5mg GIGANT Nicolas 23-02-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{14}H_{15}NO_3S$	277.077264041 g.mol ⁻¹	
<chem>O=S(=O)(c1ccccc1)N2CCCC3C2N(C3)c4ccccc4</chem>	ICOA-IGU-L-04G10 : 5mg GIGANT Nicolas 03-07-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{18}H_{20}N_2O_2S$	328.124548584 g.mol ⁻¹	
<chem>O=C/C=C/C1=CC=C(C=C1)N1C=CC=C1</chem>	ICOA-IGU-L-02H08 : 5mg GIGANT Nicolas 16-11-2011 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{10}H_8N_2O_2$	188.05857751 g.mol ⁻¹	
<chem>COC1CCN(C1)C(=O)N2C(=O)C(=O)N(C2)C(=O)OC3=CC=CC=C3</chem>	ICOA-IGU-L-04A10 : 5mg GIGANT Nicolas 24-02-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{26}H_{22}N_2O_6S$	490.119857136 g.mol ⁻¹	
<chem>COC1CCN(C1)C(=O)N2C(=O)C(=O)N(C2)C(=O)OC3=CC=CC=C3</chem>	ICOA-IGU-L-186 : 0mg GIGANT Nicolas 16-11-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{19}H_{24}N_2O_4$	344.173607266 g.mol ⁻¹	
<chem>O=C/C=C/C1=CC=C(C=C1)N1C(=O)N(C1)C(=O)OC2=CC=CC=C2</chem>	ICOA-IGU-L-04A08 : 5mg GIGANT Nicolas 24-02-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{23}H_{24}N_2O_5S$	480.1355072 g.mol ⁻¹	
<chem>O=C/C=C/C1=CC=C(C=C1)N1C(=O)N(C1)C(=O)OC2=CC=CC=C2</chem>	ICOA-IGU-L-04F11 : 5mg GIGANT Nicolas 02-07-2012 Responsable : Pascal BOUYSSOU	$C_{18}H_{18}BrNO_3S$	391.024162162 g.mol ⁻¹	

Il y a 202 réponse(s) répartie(s) sur 26 page(s) page 1 page 2 Aller à la page

L-g-Chimio 1.4 Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 13 : Résultats d'une recherche

En haut et en bas de la page de résultats, vous pouvez changer de page, soit page par page, soit vous pouvez aller directement à une page précise. La page de résultats affiche la structure avec la formule brute et la masse molaire correspondante. En face de la structure, vous avez la référence de la ou des fiches avec le numéro de stockage, la masse stockée, le nom de l'utilisateur qui a renseigné la fiche et la date de saisie. **Les doublons étant admis par le système, vous pouvez avoir plusieurs fiches pour une même structure (Image 14)**

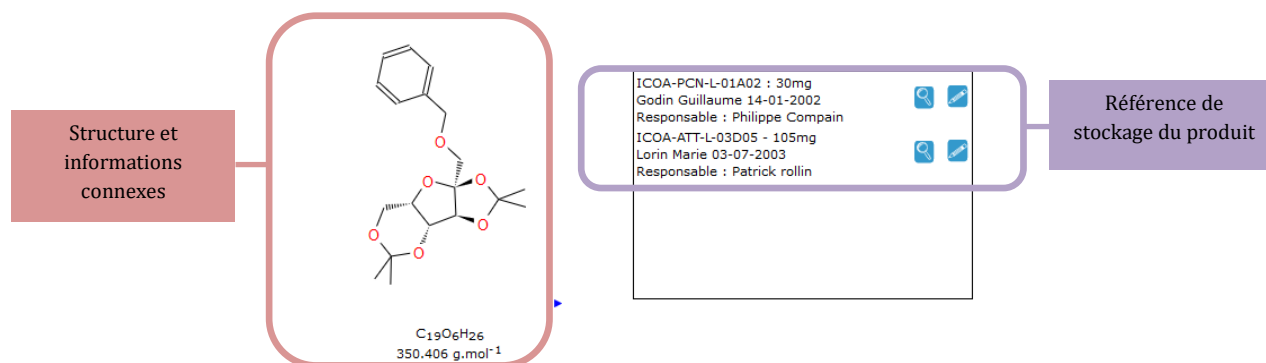




Image 14 : Existence de deux fiches pour une même structure

Si vous souhaitez consulter votre fiche, cliquez sur l'icône : , si vous souhaitez modifier les données d'une de vos fiches, cliquez sur l'icône : .

Astuce :

Vous pouvez copier (au format texte) une structure qui vous intéresse directement à partir de la page de résultat. Effectuez un clic droit sur la structure, vous obtenez un menu (Image 15).

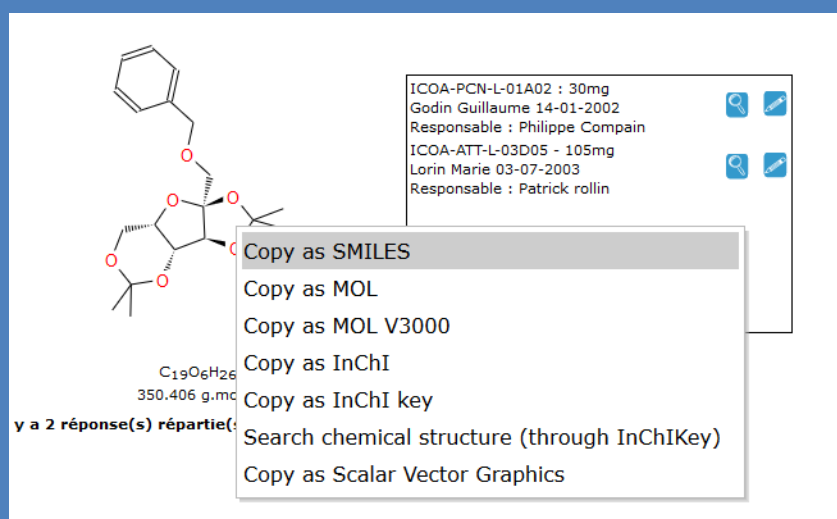


Image 15 : menu JSME

Cela permet de copier au format texte de type mol (d'autres formats sont disponibles Smiles, InChI) la structure moléculaire. Ensuite, copiez le texte dans un éditeur de texte (bloc-notes, wordpad, etc) et sauvegarder dans un fichier avec l'extension « mol ».

3. CONSULTER UNE FICHE


Si vous avez cliqué sur l'icône  dans la page des résultats de la recherche, vous accédez à la consultation de la fiche de la substance. Celle-ci est modulée en fonction des droits de l'utilisateur.



Image 16 : Menu de la fiche de consultation

Tous les utilisateurs ont l'onglet « Structure » et « Analyses ». Le responsable et l'administrateur ont en plus l'onglet « Résultats Bio ». Par contre, seul l'administrateur dispose de l'onglet « Historique ».

a) ONGLET « STRUCTURE »

Pour le premier onglet ([Image 17](#)), vous visualisez l'ensemble des données de la structure. Elles sont réparties en quatre catégories : les données saisies par l'utilisateur, les données calculées par le système et les données importées par l'administrateur.

- Les données saisies par l'utilisateur qui sont visualisées sur cet onglet sont la structure en 2D, le mode opératoire, les observations, la couleur de la substance, la masse du produit stockée en mg, l'origine de la molécule, le type de produit, l'analyse élémentaire expérimentale, le type de purification, la référence du cahier de laboratoire, le point de fusion, le point d'ébullition, les précautions particulières à prendre vis-à-vis du produit, les solvants de solubilisation de la substance, les références bibliographiques :
 - le numéro DOI ([http://fr.wikipedia.org/wiki/Digital Object Identifier](http://fr.wikipedia.org/wiki/Digital_Object_Identifier)),
 - le numéro CAS ([http://fr.wikipedia.org/wiki/Num%C3%A9ro CAS](http://fr.wikipedia.org/wiki/Num%C3%A9ro_CAS)),
 - le numéro HAL ([http://fr.wikipedia.org/wiki/Hyper articles en ligne](http://fr.wikipedia.org/wiki/Hyper_articles_en_ligne))
- Les données calculées par le système sont l'analyse élémentaire théorique, la masse molaire et formule brute.
- Les données générées par le système visualisées sur la fiche sont le numéro de stockage, le numéro constant, la date d'entrée, le nom de la personne qui a saisi les données.
- Les données importées par l'administrateur sont le numéro de la Chimiothèque Nationale et la tare du pilulier.
- Pour les Chimiothèques ayant utilisé les versions antérieures de L-g-Chimio vous avez des données au niveau des champs : Logp, Vérifie les règles de Lipinski, Nombre d'accepteurs, Nombre de liaisons rotatives, Nombre d'atomes aromatiques, Nombre de liaisons aromatiques, Nombre de donneurs, Nombre d'atomes asymétriques, Point de fusion, Point d'ébullition. Ces données étaient calculées par les outils de la société Chemaxon que nous n'utilisons plus dans cette nouvelle version.

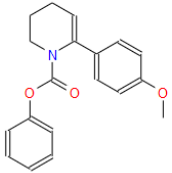
Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Structure **Analyses**

Nom : Phenyl-6-(4-methoxyphenyl)-3,4-dihydropyridine-1(2H)-carboxylate



Note sur la configuration :

Mode opératoire :
Sous atmosphère inerte, une solution de 50 mg de phosphate vinylique x (0.11 mmol, 1 éq.) et de 8 mg PdCl₂(PPh₃)₂ (0.011 mmol, 0.1 éq.) dans 1 mL de THF anhydre est dégazée trois fois avant d'être agitée pendant 15 minutes. 31 mg (0.14 mmol, 1.25 éq.) de dioxazaborocane, 0.17 mL d'une solution aqueuse de Na₂CO₃ 2M (0.33 mmol, 3 éq.), 0.25 mL d'eau et quelques gouttes d'EtOH sont ajoutées au milieu réactionnel avant d'être porté à reflux pendant 90 minutes. Après refroidissement, la solution est filtrée sur célite et rincée à l'AcOEt et à l'eau. La phase aqueuse est extraite à l'AcOEt, puis les phases organiques sont lavées avec une solution aqueuse saturée en NaCl, séchées sur MgSO₄, filtrées et concentrées. Une chromatographie sur gel de silice (éluant : EP/AcOEt, 95/5 à 8/2) permet d'isoler le composé x (24 mg, 71%) sous forme d'un solide blanc.

Observations :

Numéro : ICOA-IGU-L-04E07
Numéro constant : 18346758
Numéro Chimiothèque Nationale :
Code barre/QRcode :
Date d'entrée : 2012-03-09 11:02:13
Couleur du produit :
Masse molaire : 309.359 g.mol⁻¹
Masse de produit disponible : 5 mg
Tare du pilulier : 0 mg
Présent en plaque(s) : Non
Formule brute : C₁₉NO₃H₁₉
Nom : Nicolas GIGANT
Origine de la molécule : Synthèse
Type du produit : Libre
Etape de synthèse : Inconnue
Aspect du produit : solide
Logp : 3.84
Vérifier les règles de Lipinski : oui
Analyse élémentaire théorique : C(73.77%), N(0.00%), O(15.52%), H(6.19%)
Analyse élémentaire expérimentale :
Type de purification : colonne
Référence du cahier de laboratoire : NG376
Nombre d'accepteurs : 3
Nombre de liaisons rotatives : 4
Nombre d'atomes aromatiques : 12
Nombre de liaisons aromatiques : 12
Nombre de donneurs : 0
Nombre d'atomes asymétriques : 0
Point de fusion : 96
Point d'ébullition :
Précaution(s) :
Solvant(s) : acétate d'éthyle, acétone, chloroforme, dichlorométhane, THF
numéro HAL :

numéro DOI :Référence CAS :


 L-g-Chimio 1.4Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 17 : Onglet "Structure"

b) ONGLET « ANALYSES »

Dans l'onglet « Analyses », (Image 18), vous pouvez visualiser l'ensemble des résultats des analyses effectuées sur la substance, qui ont été saisies par l'utilisateur. Sur la partie gauche, vous avez les résultats numériques et sur la partie droite, vous avez les fichiers chargés par l'utilisateur et disponibles au téléchargement.

chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Structure **Analyses**

Pureté mesurée : %

Méthode de mesure de la pureté :

Spectrométrie UV :

Spectrométrie de Masse :
SM (ES) : m/z = 400.5 [M++]+.
Source d'ionisation :

Spectrométrie de Masse haute résolution :
HRMS (ESI) m/z : [M+Na]⁺ calculée pour C₂₁H₂₈N₂O₆Na 427.1845 trouvée 427.1832.
Source d'ionisation :

RMN ¹H :
0.45 t 1H
3.60 dd 1H
3.84 s 3H
3.86 s 4H
4.20 dd 1H
4.57 s 2H
6.64 s 2H
7.34 m 5H

[Télécharger le fichier](#)


RMN ¹³C :
150.12
138.27
136.10
137.05
128.31
127.68
127.69
103.69
76.62
73.20
60.65
55.97
55.77

[Télécharger le fichier](#)

Spectrométrie Infrarouge :
2936
1735
1589

M D :
Température :
Concentration :
Solvant :

CCM :
RF :
Solvants utilisés :


L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 18 : Onglet "Analyse"

c) ONGLET « RESULTATS BIO »

L'onglet « Résultats Bio » accessible qu'aux responsables, chefs et administrateur permet d'avoir sous forme tableau les résultats, de tous les tests biologiques effectués sur la substance

consultée ([Image 19](#)). Un résultat apparaît seulement s'il a été importé par l'administrateur grâce aux outils d'importation (voir : Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**).

The screenshot shows the 'Chimiothèque' interface from the Institut de Chimie Organique et Analytique. It features a navigation menu on the left and a table of results under the 'Analyses' tab. The table contains the following data:

Cible	Actif	Résultats				Commentaires
		% d'activité	% inhibition	IC ₅₀ en nM	EC ₅₀ en nM	
AchE humaine	■	18.2	44.9			

Callouts in the image identify 'AchE humaine' as the 'Nom de la cible' and 'P22303' as the 'Référence UniProt'.

Image 19 : Onglet "résultats bio"

En passant la souris sur le nom du test biologique, vous accédez aux détails ([Image 20](#)). Le numéro à côté du nom du test biologique ici P22303 sur l'[Image 20](#), c'est la référence UniProt (<http://fr.wikipedia.org/wiki/UniProt>) de la protéine, en cliquant dessus, vous êtes directement dirigé sur les données de cette protéine sur le site UniProt.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

icoa

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Structure **Analyses**

Cible	Actif	Résultats					Commentaires
		% d'activité	% inhibition	IC ₅₀ en nM	EC ₅₀ en nM	Autre résultat	
AcChE humaine - P22303		18.2	44.9				

Laboratoire :
Programme PIR « ACHE »
Les mesures d'inhibition ont été réalisées en collaboration avec l'équipe du Dr Catherine Guillou de l'ICSN, par Olivier Pamard (ICSN) et Sophie Corvaisier (CERMN).

concentration :
0,001mol. L⁻¹

Protocole du test :
Les mesures d'inhibition des produits de la CNE vis-à-vis de l'activité de l'acétylcholinestérase ont été réalisées à 9.10⁻⁶ M. Les enzymes étudiées ont été ACHE humaine et ACHE electrophorus electricus (anguille électrique).

Sur les 640 produits de la CNE, 42 produits présentent une inhibition de l'activité d'ACHE humaine supérieure à 80%, 21 produits présentent une inhibition de l'activité d'ACHE electrophorus electricus supérieure à 80% et 11 produits présentent une inhibition de l'activité supérieure à 80% sur les deux types d'enzymes.

Il faut noter que les quantités de produits fournis n'ont pas permis de réaliser les mesures d'inhibition en duplicate.

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 20 : affichage des détails du test biologique

d) *ONGLET « HISTORIQUE »*

Cet onglet n'est accessible qu'aux seuls administrateurs (Image 21). Il permet de visualiser l'historique des changements effectués sur la fiche de la substance consultée. Cette historisation, apporte sous forme de tableau les informations suivantes : le champ qui a été modifié, par quelle personne, à quelle date, on a également l'ancienne valeur du champ.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Administration

- Plaques
- Résultats Bio
- Exportation
- Importation
- Utilisateurs
- Paramètres

Structure Analyses Résultats Bio Historique


Modifications effectuées sur cette fiche

Qui	Date de la modification	Champs	Ancienne valeur
TRAJKOVIC jonathan	2010-07-28 15:06:16	Masse de produit disponible :	112

L-g-Chimio 1.4 Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 21 : exemple d'historique des modifications d'une fiche

4. MODIFIER UNE FICHE

Si vous avez cliqué sur l'icône , vous accédez dans la page des résultats de votre recherche à la modification de la fiche de la substance. Celle-ci est modulée en fonction des droits de l'utilisateur connecté. Le formulaire sur lequel vous arrivez est identique à celui de la saisie (chapitre I.B). Pour tous les utilisateurs, à l'exception de l'administrateur, le champ « type de structure » est désactivé. Seul l'administrateur peut modifier le type de la structure (*Libre, Sous contrat ou breveté*) car ce changement d'état implique, si vous êtes en numérotation automatique, une modification du numéro du stockage physique.

Si vous êtes en numérotation automatique (Erreur ! Source du renvoi introuvable.) et que la masse du produit est modifiée, dans les 7 jours suivant la saisie initiale de la substance. Alors, une modification du numéro de stockage (celui défini à l'étape : Erreur ! Source du renvoi introuvable.) peut intervenir uniquement si la masse passe au-dessus ou en dessous de la limite de stockage défini au chapitre Erreur ! Source du renvoi introuvable..

Si la modification de la masse intervient après ces 7 jours suivant la saisie initiale alors le numéro de stockage est modifié seulement lorsque la valeur de la masse tombe à zéro mg.

D. RECHERCHER SUR L'ENSEMBLE DES DONNEES LIBRES ET BREVETES

La section « Rechercher » du « Menu » gauche (Image 22) permet à l'utilisateur d'effectuer une recherche selon divers critères dans l'ensemble des substances libres et brevetées de la Chimiothèque du laboratoire.

Les substances sous contrats apparaissent uniquement pour les propriétaires (*chimiste, responsable et chef*) de cette substance.

Tout le monde peut effectuer une recherche par structure (exacte, sous structure ou similarité), par masse molaire, formule brute et numérotation. Pour ce dernier, vous pouvez utiliser soit le numéro unique aléatoire à 8 chiffres, soit le numéro défini dans la section « paramètres-produit » (exemple : ICOA-FST-L-01A02 voir Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), soit le numéro de la Chimiothèque Nationale (CN000000V) s'il a été importé par l'administrateur, soit par le QR-code.

Pour la masse molaire et la formule brute, vous pouvez effectuer une recherche exacte en cochant la case « exacte ». Sinon par défaut, vous effectuez une recherche par motif.

Image 22 : formulaire de recherche

Une fois le critère de recherche renseigné et le bouton « Recherche » cliqué, la page de résultat apparaît. La présentation est semblable à la section « modification » (chapitre I.C.2) mais avec

uniquement la possibilité de consulter les substances. La fiche de consultation ne contient que les onglets « structure » et « Analyses ».

E. CONSULTATION DES RESULTATS DES TESTS BIOLOGIQUES

Cet onglet du menu est réservé aux types d'utilisateurs : **responsables** et **chefs**. Il leur permet de consulter pour chaque test biologique effectué, les résultats sur leurs substances. Ces résultats devront avoir été au préalable importés par l'administrateur voir Chapitre.

L'utilisateur doit en premier sélectionner la cible, le type de test biologique et enfin le type de résultat (IC50, %activité, ...). L'utilisateur peut visualiser ses molécules impliquées dans le test biologique et les résultats correspondants ([Image 23](#)).

The screenshot shows the 'Chimiothèque' interface from the Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA). It features a navigation menu on the left, a search and filter section, and a main table of results. The 'Description' box provides details about the test protocol and laboratory.

Menu:

- Saisie
- Modifications
- Résultats Bio
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

cibles répertoriées: P22303 - AchE humaine

Type d'information: Tous les résultats

Description:

- Laboratoire:** Programme PIR « AChE » Les mesures d'inhibition ont été réalisées en collaboration avec l'équipe du Dr Catherine Guillou de l'ICSN, par Olivier Pamard (ICSN) et Sophie Corvaisier (CERMM).
- concentration:** 0.001
- Protocole du test:** Les mesures d'inhibition des produits de la CNE vis-à-vis de l'activité de l'acétylcholinestérase ont été réalisées à 9,10⁻⁶ M. Les enzymes étudiées ont été AChE humaine et AChE electrophorus electricus (anguille électrique). Sur les 640 produits de la CNE, 42 produits présentent une inhibition de l'activité d'AChE humaine supérieure à 80%. 21 produits présentent une inhibition de l'activité d'AChE electrophorus electricus supérieure à 80% et 11 produits présentent une inhibition de l'activité supérieure à 80% sur les deux types d'enzymes. Il faut noter que les quantités de produits fournis n'ont pas permis de réaliser les mesures d'inhibition en duplicate.

Structures	IC ₅₀	EC ₅₀	Actif/Inactif	% activité	% inhibition	Autre résultat	Commentaires
 ICOA-PBU-L-01B02 99814434					32.8		
 ICOA-PBU-L-02D06 54837099					50.3		

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 23 : Résultat biologique pour les molécules d'une équipe pour un test biologique choisi

F. PARAMETRES DE SON COMPTE

Chaque utilisateur peut modifier les paramètres de son compte ([Image 24](#)). Il peut changer l'adresse courriel, la langue du compte (*française ou anglaise*) ou encore modifier son mot de passe.

Pour le(s) administrateur(s), chef(s), responsable(s), l'option d'activation ou désactivation du retour par courriel à chaque entrée d'un de ses utilisateurs est possible.

Chaque responsable reçoit, si l'option est activée ici, un courriel à chaque entrée d'un des utilisateurs de son équipe, le chef lui aura l'ensemble des utilisateurs des équipes qui lui sont rattachées.

L'administrateur reçoit un courriel pour toutes les entrées des utilisateurs.



Chaque utilisateur peut choisir la langue de l'interface soit le français (fr) soit l'anglais (us).

Chaque utilisateur peut modifier le mot de passe qui lui a été attribué automatiquement. Le nouveau mot de passe doit d'être d'une longueur minimale de 8 caractères.

Image 24 : Page de paramétrage de son compte

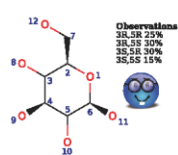
G. FAQ

Le fichier d'analyse téléchargé durant la saisie n'apparaît pas quand on consulte la fiche :

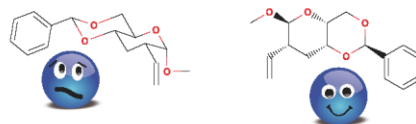
Ce type de problème provient du paramétrage de PHP. Dans la configuration de PHP, éditer le fichier php.ini (pour une distribution Linux aller dans le répertoire /etc, pour une distribution Windows cliquez avec le bouton droit sur l'icône  dans la barre des tâches et ensuite dans l'onglet « open Dashboard » puis sur la roue crantée  à côté de http Server puis cliquez sur PHP à gauche). Recherchez le paramètre « memory_limit » et « post_max_size » et augmentez leur valeur respective pour qu'elle soit représentative de l'ensemble des données postées par l'utilisateur pour la saisie d'une fiche de molécules. Si l'utilisateur charge dans une fiche 4 fichiers de 10M chacun, plus les données sous forme de texte, il faut donc que ces paramètres soit au moins égaux à 50M : post_max_size = 50M, memory_limit=50M.

II. ANNEXES

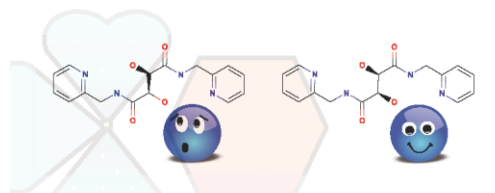
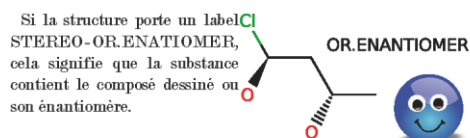
A. RECOMMANDATIONS POUR LA NORMALISATION DE STRUCTURES DE LA CN



Si plusieurs stéréoisomères sont présent dans la solution: numéroté les atomes et utiliser cette numérotation pour spécifier les proportions des stéréoisomères dans le champs Observations de la base données.

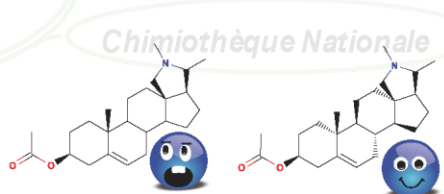


Il ne faut pas utiliser de représentations en pseudo-perspectives pour spécifier la position des groupes.



Ne pas utiliser de représentations spécifiques (Haworth, Fisher,...) pour spécifier la stéréochimie.

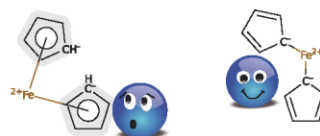
Deux atomes asymétriques ne doivent pas être reliés par une liaison stéréo.



Spécifier la stéréochimie de tous les centres asymétriques explicitement, surtout si d'usage elle est implicite comme, par exemple, pour les chassis gonane, estane, androstane, pregnane et leurs alcènes.

5

Organo-métalliques



Préférer des représentations utilisant des liaisons covalentes dans le respect des règles de Lewis. Seules les liaisons conventionnelles (simple, double, triple et aromatique) sont supportées par tous les formats électroniques utilisés dans les bases de données.

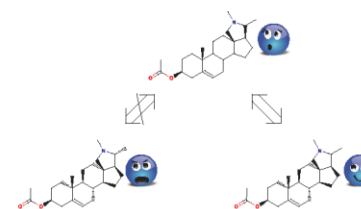
6



Recommandations pour la normalisation de structures de la Chimiothèque Nationale

F. Ruggiu, G. Marcou, D. Horvath, A. Varnek
Laboratoire d'Infochimie, Université de Strasbourg

Ce document résume des recommandations pour représenter les structures des substances référencées dans la Chimiothèque Nationale afin de diminuer le nombre d'ambiguïtés qui nuisent au traitement automatique des données et à l'interprétation des résultats de criblage.



22 Février 2012

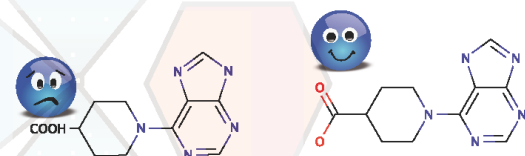
1

Format et identifiant

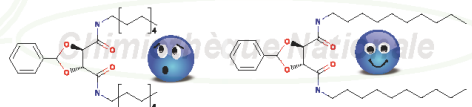
Vérifier avant de transmettre des structures que les identifiant sont conformes à la Chimiothérapie Nationale.

Utiliser le format SDF v2000. La quatrième ligne du fichier doit se terminer par V2000. Certains outils comme ChemDraw sauvegardent automatiquement en SDF v3000 si des éléments non supportés par le format v2000 sont introduits dans le dessin. Dans ce cas, il faut soit refaire une sauvegarde en éliminant ces composants (souvent des groupements chimiques, des labels, des couleurs, des formes géométriques), soit utiliser un outil tiers pour faire la conversion.

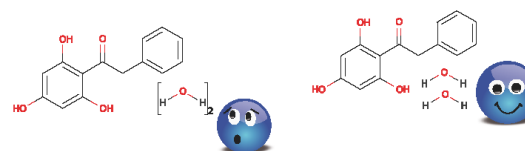
Groupes implicites/explicites



Ne pas utiliser une représentation implicite de groupes chimiques

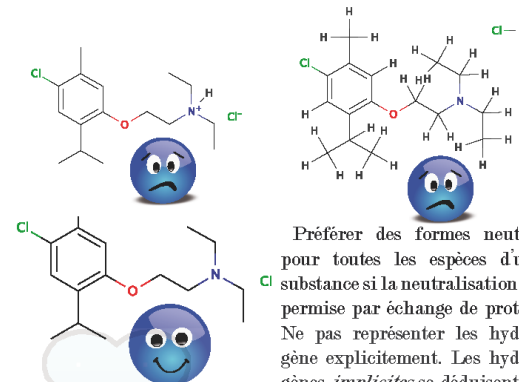


Ne pas utiliser de notation raccourcies.

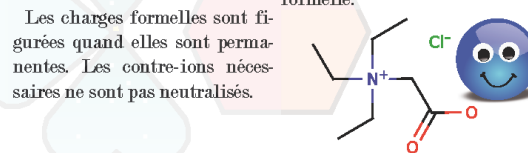


Représenter explicitement les molécules d'eau des hydrates.

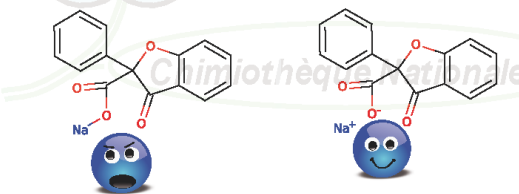
Hydrogènes et charges formelles



Préférer des formes neutres pour toutes les espèces d'une substance si la neutralisation est permise par échange de proton. Ne pas représenter les hydrogènes explicitemment. Les hydrogènes *implicites* se déduisent de l'état des valences et de la charge formelle.

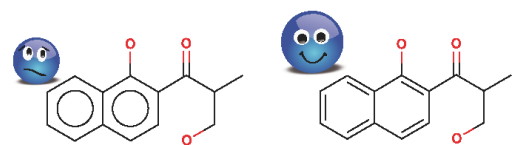


Les charges formelles sont figurées quand elles sont permanentes. Les contre-ions nécessaires ne sont pas neutralisés.



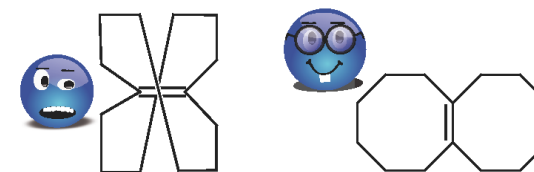
Ne pas neutraliser en ajoutant une liaison covalente.

Aromatisations



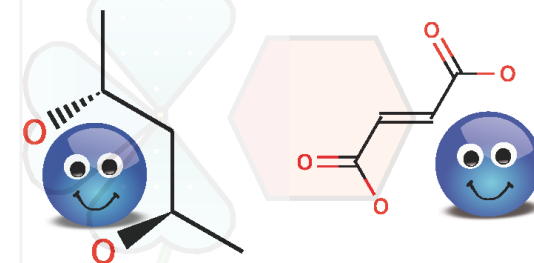
2 Les formes kekulisés des cycles sont toujours préférées. 3

Croisements

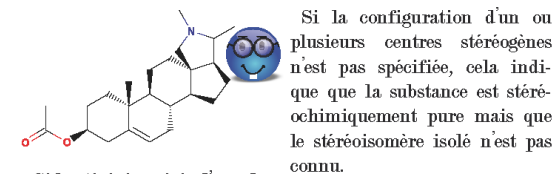


Ne pas croiser les liaisons sans nécessité.

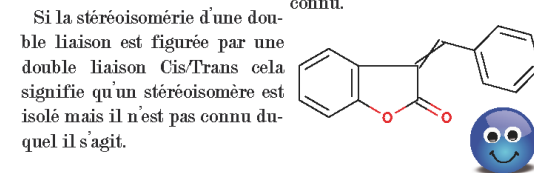
Stéréochimie



La configuration absolue des centres stéréogènes est spécifiée par l'orientation des liaisons qui en partent. Le « coin » d'une liaison stéréo doit être du côté de l'atome asymétrique.



Si la configuration d'un ou plusieurs centres stéréogènes n'est pas spécifiée, cela indique que la substance est stéréochimiquement pure mais que le stéréoisomère isolé n'est pas connu.



Si la stéréoisomérisie d'une double liaison est figurée par une double liaison Cis/Trans cela signifie qu'un stéréoisomère est isolé mais il n'est pas connu duquel il s'agit.

4