

formations aux bases de données en chimie

Programme

- I - Scifinder Scholar permettant l'accès aux Chemical Abstracts
- II - Beilstein Crossfire, interface donnant accès aux bases Beilstein (substances organiques) et Gmelin (composés minéraux et organométalliques)
- III - ISIS/Base, interface dédiée à la recherche a) de réactions en chimie organique, b) de substances organiques commerciales, c) de composés pharmacologiquement actifs. Les bases interrogées sont commercialement éditées par la société MDL
- IV - ISIS/Base, outil de gestion et/ou de création de bases locales de substances, pour pouvoir gérer des stocks ou des composés synthétisés au laboratoire. Ces bases locales seront compatibles avec celles de la Chimiothèque Nationale (<http://chimiotheque-nationale.enscm.fr/>)

De nombreux exercices d'application permettront de mettre immédiatement en pratique, et ainsi de mieux assimiler, les nouvelles notions. Une connaissance préalable d'ISIS/Draw (logiciel d'édition de structures chimiques) est souhaitable.

Public concerné

Enseignants, chercheurs, Ingénieurs, techniciens

Modalités pratiques

Durée : ½ journée par logiciel
Lieu : Université de Montpellier II
dates : à déterminer

Responsable

Gilles Niel (ENSCM) 04 67 14 43 37
Philippe Jauffret (ENSCM) 04 67 14 43 35

I - FORMATION – SCIFINDER SCHOLAR PROGRAMME ET OBJECTIFS

1- Recherche par auteur

- Interêts et limitations (initiales, doublons)
- Exporter des références.

2 - Recherche par mots-clés

- Choisir les mots-clés appropriés et utiliser les opérateurs logiques si besoin
- Retrouver des revues, raffiner une liste de réponses par terme d'indexation
- Retrouver les références citées et citantes.

3 - Recherche de substances par structure exacte

- Retrouver les références et les réactions associées à la substance – parcours rétrosynthétique
- Limitations pour les composés organométalliques
- Maîtriser les filtres de requête.

4 - Recherche de substances par sous-structure

- Gérer le nombre de substituants, utiliser les **Templates**
- Utiliser les points d'attachement variables, les groupements variables
- Rechercher des composés avec une stéréochimie fixée
- Analyser un ensemble de réponses en fonction des substituants, groupements variables
- Recherche des formes tautomères

5- Recherche de réactions par sous-structure

- Maîtriser le **mapping**
- Utiliser les groupements fonctionnels
- Retrouver des réactions chimiosélectives

II - FORMATION – BEILSTEIN PROGRAMME ET OBJECTIFS

1- Recherche par nom de composé – Interrogation par faits

- Utiliser les différents outils de visualisation des réponses
- Retrouver une propriété particulière
- Naviguer entre les 3 parties de la base (hyperliens).

2 - Recherche par sous-structure

- Choisir un éditeur de structure
- Utiliser les groupements génériques définis par l'utilisateur
- Croisement de listes de réponses.

3 - Recherche par sous-structure

- Spécifier le statut des atomes
- Utiliser les groupements génériques définis par l'utilisateur et les groupements prédéfinis.

4 - Recherche sous-structurale de réaction

- Utiliser le **mapping** et les outils de visualisation associée.
- Croisement de listes de réponses.

5- Interrogation croisée Faits et Schéma Réactionnel

- Utiliser les **Basic indexes**

6 - Réactions chimiosélectives

- Réactions intramoléculaires vs intermoléculaires.

7 - Méthodes de Synthèse

- Cibler un type de réactants.
- Exclusion de listes de réponses.

III - PROGRAMME DE FORMATION À ISIS/BASE

SESSION INITIATION

A – INTRODUCTION A L'INTERFACE D'ISIS/BASE

B – INTERROGATIONS DANS LA BASE DE PRODUITS COMMERCIAUX ACD

Recherche par nom, fournisseur, prix.

Recherche par formule exacte.

Recherche de composés stéréoisomères.

Recherche par sous-structure.

C - INTERROGATIONS PAR RÉACTIONS DANS LA BASE RXNBRO

C-I- Recherche par sous-structure

- Dessin de sous-structures et spécifications du statut des atomes
- Utiliser les spécifications du **mapping** et du changement de statut des liaisons
- Différents modes de recherche : **Substructure** et **Current Reaction**.

C-II- Recherche par sous-structure

- Spécification du statut des atomes, du **mapping**
- Spécification du nombre de cycles
- Réactions mono- et multi-étapes
- Sauvegarde d'une liste de réponses.
- Clusterisation par réactif.

C-III- Recherche par sous-structure, exploration des fonctionnalités

- Utilisation des différents formulaires d'interrogation
- Liste d'atomes
- Création des groupes génériques et points d'attachements
- Cycles de taille variable: **Link Node**

C-IV- Réaction stéréosélective

- Précision de la stéréochimie, de la topologie
- Structure "interdite"
- Sauvegarder les réponses dans Excel

IV - Formation ISIS/Base : objectifs et prérequis

ISIS/Base est une application Windows simple, économique et largement utilisée pour la gestion de bases de données chimiques (bases de substances ou de réactions). Elle peut en particulier être utilisée pour gérer les stocks de produits du laboratoire, ou pour gérer une « chimiothèque » des composés synthétisés dans une équipe (éventuellement compatible avec les standards de la Chimiothèque Nationale). Il est également possible de stocker dans une base ISIS les résultats d'analyses ou de tests effectués sur des composés. Dans les bases de données constituées, il est possible d'effectuer toutes sortes de recherches, en particulier par structure ou sous-structure.

L'objectif de cette formation est de parvenir à une maîtrise de ce logiciel suffisante pour créer et exploiter des bases de données adaptées à des besoins particuliers. Les personnes suivant cette formation seront capables :

- D'installer le logiciel ISIS/Base;
- De créer une nouvelle base de données;
- De modifier la structure de la base, c'est à dire d'ajouter, de supprimer ou d'éditer des champs;
- De créer des menus adaptés aux données spécifiques contenues dans une base, pour la saisie interactive de données, l'interrogation et la visualisation;
- De modifier le contenu de la base;
- Enfin, d'exporter et d'importer des données (fusion de bases de données).