

2019

L-g-Chimio V1.5



Laurent ROBIN

laurent.robin@univ-orleans.fr

01/05/2019

| | |
|--|-----------|
| I. Installation | 1 |
| A. Systèmes requis..... | 1 |
| B. Prérequis | 1 |
| 1. Configuration de PHP..... | 1 |
| 2. Configuration de PostgreSQL et Bingo | 3 |
| 3. Mise en place des fichiers..... | 4 |
| C. Procédure d'installation | 4 |
| 1. Première étape | 6 |
| 2. Deuxième étape..... | 7 |
| 3. Troisième étape | 8 |
| 4. Quatrième étape | 9 |
| 5. Cinquième étape..... | 10 |
| 6. Sixième étape | 11 |
| 7. Septième étape..... | 12 |
| 8. Étape finale..... | 14 |
| D. Paramétrages | 15 |
| 1. Généraux | 15 |
| 2. Produits..... | 15 |
| 3. Exportation | 18 |
| 4. Maintenance..... | 19 |
| E. Utilisateurs | 20 |
| 1. Visualiser..... | 20 |
| 2. Ajouter..... | 21 |
| 3. Désactiver | 24 |
| 4. Réactiver | 24 |
| 5. Modification | 24 |
| 6. Équipes | 25 |
| II. Manuel d'utilisation | 26 |
| A. Connexion..... | 26 |
| 1. Connexion à l'application | 26 |
| 2. Mot de passe perdu..... | 28 |
| B. Saisie d'un nouveau produit..... | 29 |
| 1. Première page de saisie..... | 29 |
| 2. deuxième page de saisie..... | 32 |
| C. Modification et consultation des données..... | 34 |
| 1. Effectuer une recherche..... | 34 |
| 2. Résultat de la recherche..... | 37 |
| 3. Consulter une fiche..... | 39 |
| a) Onglet « Structure »..... | 39 |
| b) Onglet « Analyses »..... | 40 |
| c) Onglet « Résultats Bio » | 41 |
| d) Onglet « Historique » | 43 |
| 4. Modifier une fiche | 44 |

| | |
|---|-----------|
| D. Rechercher sur l'ensemble des données libres et brevetés | 45 |
| E. Consultation des résultats des tests biologiques | 46 |
| F. Paramètres de son compte | 46 |
| G. FAQ..... | 47 |
| III. <i>Manuel d'administration</i> | 48 |
| A. Création des plaques 96 puits..... | 48 |
| 1. Création d'une plaque à partir d'une boîte ou d'une autre plaque (plaqué mère) existante | 50 |
| 2. Création d'une plaque en définissant chaque puits | 51 |
| a) Création puits par puits..... | 52 |
| b) Création grâce à un fichier de type CSV..... | 54 |
| c) Méthode mixte..... | 55 |
| B. Gestion des plaques 96 puits | 55 |
| 1. Suivi des tests biologiques..... | 57 |
| 2. Visualisation du contenu de la plaque..... | 59 |
| 3. Modification d'une plaque | 61 |
| 4. Suppression d'une plaque | 63 |
| C. Résultats des tests biologiques..... | 63 |
| 1. Importation des résultats | 63 |
| 2. Consultation des résultats | 66 |
| D. Importation de données dans L-g-Chimio..... | 68 |
| 1. Importation de la numérotation de la chimiothèque nationale..... | 68 |
| 2. Importation de la tare des piluliers | 70 |
| 3. Importation de la liste des molécules envoyées chez Evotec..... | 71 |
| E. Importation de fichier SDF et RDF | 72 |
| F. Exportation sélective & multicritère..... | 74 |
| G. Exportation au format CSV pour la pesée Evotec..... | 75 |
| 1. Exportation à partir d'une ou plusieurs boîtes..... | 76 |
| 2. Exportation à partir d'une liste de produits | 77 |
| H. Réattributions des molécules | 78 |
| I. Contrôle de la pureté et de la structure..... | 79 |
| IV. <i>Annexes</i> | 80 |
| A. Recommandations pour la normalisation de structures de la CN | 80 |
| B. Changement de la version 1.5..... | 82 |
| 1. Ajouts :..... | 82 |
| 2. Modifications :..... | 82 |

I. INSTALLATION

A. SYSTEMES REQUIS

Le logiciel fonctionne avec un environnement LAPP (serveur web : Apache, langage de programmation : PHP, serveur de bases de données : PostgreSQL dans un environnement Linux). Le logiciel fonctionne sous Windows mais cet environnement n'est pas recommandé pour l'utilisation en production et en toute sécurité d'Apache - PHP -PostgreSQL. Il est vivement recommandé d'utiliser cet environnement avec le cryptage SSL ([https](https://)) et de mettre en place un firewall afin de filtrer les entrées sur votre serveur.

La mise en place de l'environnement LAPP (Apache, PHP, PostgreSQL) est à confier à un service informatique.

B. PREREQUIS

1. CONFIGURATION DE PHP

Le logiciel fonctionne en plage de caractères **UTF8** et non ISO-8859-1, éditez le fichier de configuration de **PHP** (php.ini) qui se trouve sous système Linux dans le répertoire « /etc » et pour un système Windows utilisez EasyPHP (démarrez EasyPHP)[Image1](#).

The screenshot shows the EasyPHP DevServer interface. At the top, there's a navigation bar with links for applications, tools, support, website, and warehouse. Below the navigation bar, the main dashboard displays two sections: 'HTTP SERVER' and 'DATABASE SERVER'. The 'HTTP SERVER' section shows 'Apache 2.4.18' and 'Port: 80'. The 'DATABASE SERVER' section shows 'MySQL 5.7.11 x86' and 'Port: 3306'. Both sections have 'stop' and 'start' buttons. A red arrow points to the gear icon in the 'HTTP SERVER' section, which is labeled 'Open Server Settings'. Below these sections, there's a 'WORKING DIRECTORIES' section with a 'Portable Directory' field containing 'E:\EasyPHP-Devserver-16.1\eds-www'. A 'add directory' button is next to it. A note says 'If you use a removable drive, store your files in the directory indicated below.' Below this is a 'MODULES' section with a 'MySQL Administration : PhpMyAdmin 4.5.5.1' link, an 'open' button, and a 'add modules' button. At the bottom, there's a footer with the text 'EasyPHP 2000 - 2016 | www.easypg.org' and 'DEVSERVER 16.1.1'.

[Image 1](#) : Accès à la configuration de PHP via le menu d'EasyPHP sous Windows en cliquant droit sur le logo à droite dans la barre des tâches puis sur Open Dashboard.

Ensuite, cliquez sur la roue crantée pour ouvrir la configuration. Dans cette nouvelle fenêtre, à gauche dans le menu Dashboard cliquez sur PHP. Cliquez sur la version de PHP qu'utilise votre serveur web apache exemple [Image 2](#).

The screenshot shows the EasyPHP DevServer interface. On the left, a sidebar titled 'Dashboard' has a 'PHP' section with options: 'PHP 5.6.19 x86', 'PHP 7.0.4 x86', and a plus sign icon. Below it are sections for 'HTTP SERVER', 'DB SERVER', 'PYTHON', 'RUBY', and 'PERL'. The main content area is titled 'APACHE' and displays information about the server: version 2.4.18, compiler VC11, architecture x86 (32-bit), and supported languages PHP, Python, Ruby, Perl. It shows a 'Server' status with a 'stop' button, parameters (PHP version set to 5.6.19 x86, port 80, host 127.0.0.1), and details for Document Root and Server Root. At the bottom, there are tabs for Configuration File, Error Log, and Access Log.

[Image 2 : Accès à la configuration de PHP via le menu d'EasyPHP sous Windows.](#)

Puis ensuite sur « Configuration File » et sur l'icône en forme de crayon (voir [Image 3](#)) pour ouvrir et modifier le fichier php.ini.

The screenshot shows the 'Configuration File' editor for the 'php.ini' file. The sidebar on the left has the 'PHP' section selected. The main area shows the [PHP] section of the php.ini configuration file, which includes comments about the file's purpose and search order. The top right corner of the code editor has a blue pencil icon with a red border, indicating it can be edited.

```
[PHP]
;
; About php.ini
;
; PHP's initialization file, generally called php.ini, is responsible for
; configuring many of the aspects of PHP's behavior.

; PHP attempts to find and load this configuration from a number of locations.
; The following is a summary of its search order:
; 1. SAPI module specific location.
; 2. The PHPRC environment variable. (As of PHP 5.2.0)
; 3. A number of predefined registry keys on Windows (As of PHP 5.2.0)
```

[Image 3 : Accès à la configuration de PHP via le menu d'EasyPHP sous Windows.](#)

Dans le fichier php.ini, allez à l'argument :

default_charset : doit être à utf8 (default_charset = "utf-8")

Votre serveur Apache doit être mis de préférence en mode production. Pour cela, dans le fichier de configuration de PHP (php.ini), il faut que l'argument suivant :

display_errors soit à off (display_errors = Off)

Si **display_errors** reste à On (display_errors = On), l'argument **error_reporting** doit être à (error_reporting = E_ALL & ~E_NOTICE & ~E_DEPRECATED & ~E_WARNING)

2. CONFIGURATION DE POSTGRESQL ET BINGO

Vous devez mettre en place et configurer un serveur de bases de données **PostgreSQL**. Il faut créer un utilisateur spécifique « ex : *chimio_user* » avec un mot de passe pour votre base de données chimiothèque. Celui-ci doit avoir des droits que sur cette base de données.

Une fois votre serveur PostgreSQL fonctionnel, vous devez ajouter l'outil **Bingo** que vous pouvez télécharger ici :

<http://lifescience.opensource.epam.com/download/bingo.html>

Une fois Bingo téléchargé et décompressé suivez le manuel d'installation en fonction de votre système d'exploitation :

<http://lifescience.opensource.epam.com/bingo/installation-manual-postgres.html>

Une fois que vous avez exécuté le fichier bingoPg-install avec l'extension sh pour Linux ou bat pour Windows, créez une base de données (exemple : chimiotheque) qui va contenir votre chimiothèque. Ensuite, associez les outils Bingo à cette base de données avec la commande SQL :

```
psql -U postgres -d nom_de_votre_base_de_donnée -f bingo_install.sql
```

Cette association est effectuée via le compte administrateur : postgres. Une fois cette association effectuée, vous devez changer les droits sur le schema Bingo ainsi créé. Pour cela utilisez les commandes si dessous dans votre base de données (ces commandes doivent être exécutées avec le compte administrateur) :

```
grant usage on schema bingo to chimio_user;
grant select on table bingo.bingo_config to chimio_user;
grant select on table bingo.bingo_tau_config to chimio_user;
```

Attention : en cas de difficultés de connexion vérifiez dans le fichier pg_hba.conf que l'utilisateur PostgreSQL a les bonnes autorisations d'accès. N'oubliez pas d'installer le package PHP : pdo et php-pgsql permettant la communication entre PHP et PostgreSQL.

3. MISE EN PLACE DES FICHIERS

Téléchargez l'application L-g-Chimio sur l'Intranet de la Chimiothèque Nationale :

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

Une fois le fichier zip obtenu, procédez à sa décompression avec une application adéquate.

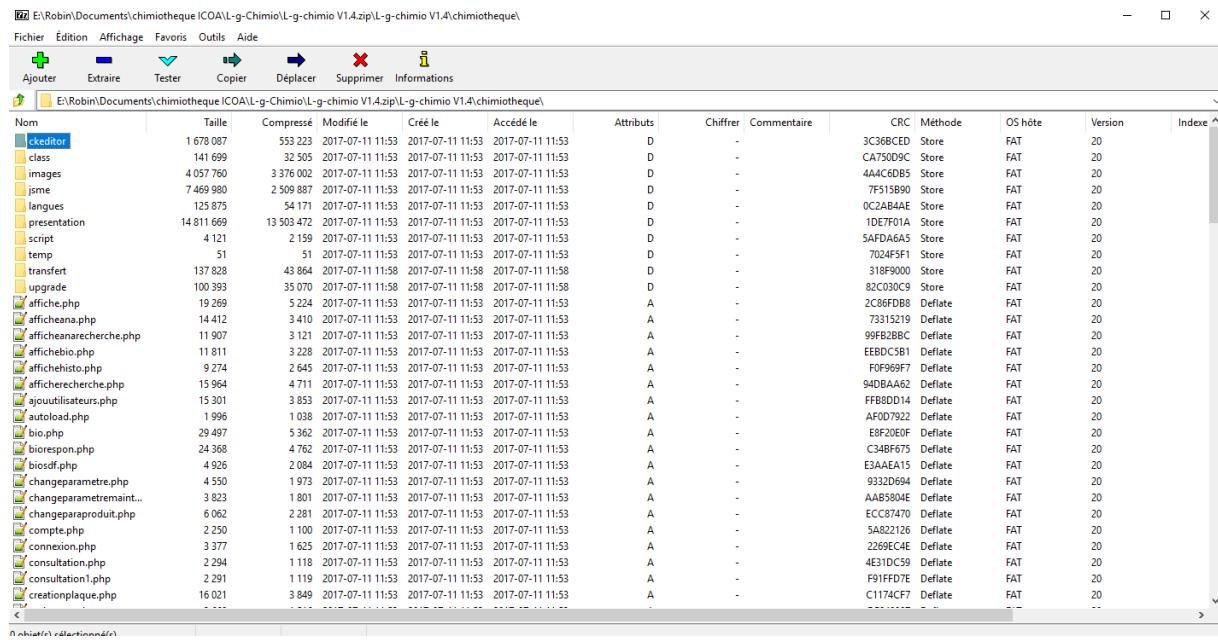


Image 4 : Vue du contenu du fichier zip

Placez le répertoire « chimiotheque » avec les fichiers décompressés ([Image 4](#)) dans le répertoire du serveur web Apache.

Sous Linux dans le répertoire « /var/www/html/ » et sous Windows dans le répertoire « www » d'EasyPHP. Exemple : si EasyPHP est à la racine de votre disque dans « c:\easyphp\www\ ».

- Une fois cette mise en place effectuée, rendre les sous répertoires « temp » et « script » accessibles en écriture : Sous Linux avec la commande chmod. exemple : chmod 777 /var/www/html/chimiotheque/temp
- Sous Windows, vérifiez que les répertoires ne sont pas bloqués. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le répertoire, puis sur « propriétés ».

C. PROCEDURE D'INSTALLATION

Démarrez les serveurs Apache et PostgreSQL et connectez-vous via un navigateur web à votre serveur web : http://votre_serveur_web/chimiotheque/. Vous allez arriver sur la page d'installation de L-g-Chimio ([Image 5](#)).



chimiothèque

Etapes

- Présentation

Installation de L-g-Chimio

Merci d'avoir choisi cette application pour gérer votre chimiothèque. Si vous rencontrez un problème vous pouvez me contacter à l'adresse suivante : laurent.robin@univ-orleans.fr

Système requis :
Le logiciel fonctionne avec un serveur Apache - PHP - PostgreSQL le tout de préférence sous Linux. Le logiciel fonctionne sous windows mais cet environnement n'est pas recommandé pour l'utilisation en production d'Apache - PHP - PostgreSQL. **Je vous recommande très fortement d'utiliser le protocole SSL avec Apache afin de crypter les échanges.**

Configuration du PHP :
Le logiciel fonctionne en plage de caractère **UTF8** et non ISO-8859-1, changer dans le fichier de configuration de PHP (php.ini) l'argument : **default_charset** doit être à utf8 (**default_charset = "utf-8"**)
Votre serveur Apache doit être mis en mode production, c'est à dire que dans le fichier de configuration de PHP (php.ini) il faut que les arguments suivants : **display_errors** doit être à off (**display_errors = Off**) ou les arguments : **display_errors** reste à On (**display_errors = On**) et l'argument **error_reporting** (**error_reporting = E_ALL & ~E_NOTICE & ~E_DEPRECATED & ~E_WARNING**)

Une fois vos serveurs Apache et PostgreSQL en place et fonctionnelles procédez à l'installation du logiciel de gestion de chimiothèque en cliquant sur suivant ci-dessous.

Laurent ROBIN
 Institut de Chimie Organique et Analytique - ICOA UMR7311
 Université d'Orléans
 Rue de Chartre - BP6759
 45067 Orléans Cedex 2

 Tél : 02 38 49 49 03
<http://www.icoa.fr>

Première étape

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

[Image 5 : Vue de la première page d'installation de L-g-Chimio](#)

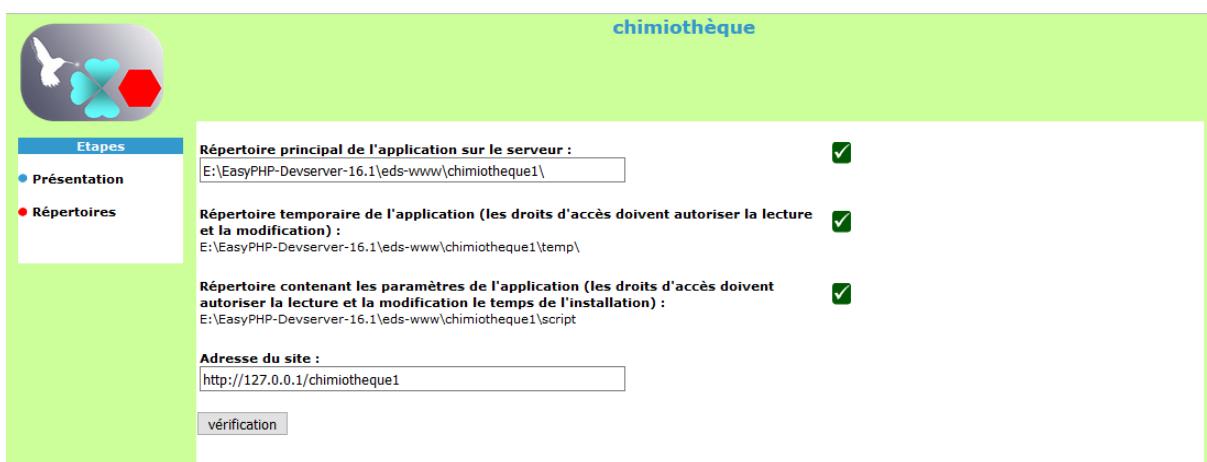
Après avoir cliqué sur le bouton « Première étape », vous arrivez sur la validation de la Licence CeCILL ([Image 6](#)). Une fois acceptée, vous arrivez à la première étape de l'installation.



[Image 6 : Validation de la licence CeCILL](#)

1. PREMIERE ETAPE

Celle-ci permet de définir et de vérifier les répertoires d'installation de l'application.



[Image 7 : Définition des répertoires de l'application](#)

Si vous n'avez pas autorisé en écriture les répertoires « script » et « temp », vous obtenez une croix rouge ([Image 8](#)). Vous devez modifier les droits sur ces deux répertoires, pour cela reportez-vous à la section I.B.3de ce chapitre page 5.



Image 8 : Répertoire « temp » et « script » non autorisés en écriture

Vous pouvez en cliquant sur le bouton « Etape suivante », passez à la suite de l'installation.

2. DEUXIEME ETAPE

Cette étape (Image 9) permet de définir les paramètres d'accès au serveur PostgreSQL et le nom de la base de données.



Image 9 : Étape N°2

Attention, pour que cela fonctionne, l'utilisateur PostgreSQL doit posséder un mot de passe. En effet, par sécurité, il est impératif que le compte utilisateur servant pour la connexion à la base de données PostgreSQL soit protégé. Les droits de ce compte doivent être au minimum : SELECT, INSERT, UPDATE, DELETE, CREATE, FILE, INDEX, ALTER.

Une fois les paramètres entrés, cliquez sur vérification. Si vous obtenez des croix rouges (Image 10) alors le nom d'utilisateur et/ou le mot de passe sont erronés. Le champ Serveur PostgreSQL est par défaut renseigné avec « localhost ». Cela signifie que le serveur PostgreSQL est sur la même machine que le serveur web Apache. Si le serveur PostgreSQL n'est pas sur la même machine alors renseignez dans le champ « Serveur PostgreSQL » l'adresse IP de celle-ci. Si après la vérification vous avez des croix rouge alors les données renseignées sont erronées.

Vous aurez également un message d'erreur serveur, juste au-dessus du champ serveur Postgresql.



The screenshot shows the chimiotheque software interface. On the left, there is a sidebar with a logo and three tabs: "Présentation", "Répertoires", and "Connexion à PostgreSQL". The "Connexion à PostgreSQL" tab is selected. The main area has a light green background and contains a form with the following fields:

- Serveur PostgreSQL :** localhost (with a red X icon)
- Nom d'utilisateur (avec les droits administrateur) :** postgres (with a red X icon)
- Mot de passe :** azerty6 (with a red X icon)
- Nom de la base à créer :** chimiotheque9 (with a red X icon)
- Vérification** button

An error message at the top of the form reads: "Error! : SQLSTATE[08006] [7] FATAL: authentication failed for user postgres".

[Image 10 : Nom d'utilisateur et/ou mot de passe erroné\(s\)](#)

Si après vérification les paramètres de la connexion à PostgreSQL sont bons, alors vous avez l'écran de l'[Image 11](#). Vous pouvez cliquer sur « Etape suivante ».



The screenshot shows the chimiotheque software interface with the same form as Image 10, but with all fields filled correctly and checked with green checkmarks:

- Serveur PostgreSQL :** localhost (green checkmark)
- Nom d'utilisateur (avec les droits administrateur) :** postgres (green checkmark)
- Mot de passe :** azerty (green checkmark)
- Nom de la base à créer :** chimiotheque1 (green checkmark)
- Etape suivante** button

[Image 11 : Vue quand tous les paramètres sont bons](#)

3. TROISIEME ETAPE

Cette étape est celle de la création de la base de données avec l'ensemble des tables, si tout se passe bien vous obtenez l'écran suivant (Image 12).

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. On the left, there is a sidebar with a logo of a white dove above three overlapping shapes (blue hexagon, red hexagon, and blue cross) and a navigation menu titled "Etapes" with the following items: Présentation, Répertoires, Connexion à PostgreSQL, and Creation des tables (which is highlighted). The main area is titled "chimiothèque". It contains a bulleted list of successful steps: "Création des tables de la base de données réussit", followed by a sub-list: "Insertion des couleurs réussit", "Insertion des données dans la table preautions réussit", "Insertion des données dans la table solvant réussit", "Insertion des données dans la table type réussit", and "table structure est correctement indexée dans postgresql.". At the bottom of this section is a button labeled "Etape suivante".

Image 12 : Étape de création de la base de données

S'il y a un problème durant la création des tables alors vous obtenez un retour des erreurs en rouge. Exemple :Image 13ci-dessous.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface with the same layout as Image 12. The sidebar shows the "Etapes" menu with "Creation des tables" selected. The main area is titled "chimiothèque". It lists several error messages in red text:

- Echec de la création des tables de la base de données
Message(s) d'erreur :
Array ([0] => 42P07 [1] => 7 [2] => ERREUR: la relation « chimiste » existe déjà)
- Echec de l'insertion des données dans la table couleur
Message(s) d'erreur :
Array ([0] => 23505 [1] => 7 [2] => ERREUR: la valeur d'une clé dupliquée rompt la contrainte unique « primaire » DETAIL: La clé « (cou_id_couleur)=(1) » existe déjà.)
- Echec de l'insertion des données dans la table precaution
Message(s) d'erreur :
Array ([0] => 23505 [1] => 7 [2] => ERREUR: la valeur d'une clé dupliquée rompt la contrainte unique « precaution_pkey » DETAIL: La clé « (pre_id_precaution)=(1) » existe déjà.)
- Echec de l'insertion des données dans la table solvant
Message(s) d'erreur :
Array ([0] => 23505 [1] => 7 [2] => ERREUR: la valeur d'une clé dupliquée rompt la contrainte unique « solvant_pkey » DETAIL: La clé « (sol_id_solvant)=(1) » existe déjà.)
- Echec de l'insertion des données dans la table type
Message(s) d'erreur :
Array ([0] => 23505 [1] => 7 [2] => ERREUR: la valeur d'une clé dupliquée rompt la contrainte unique « type_pkey » DETAIL: La clé « (typ_id_type)=(1) » existe déjà.)
- erreur de l'indexation des données de la table structure de Postgresql!
Vérifiez l'existence et la configuration de Bingo dans PostgreSQL
Array ([0] => 42P07 [1] => 7 [2] => ERREUR: la relation « index_structures » existe déjà)

At the bottom of this section is a button labeled "Nouvelle tentative".

Image 13 : Exemple d'erreurs de création des tables dans la base de données

4. QUATRIEME ETAPE

Cette étape permet de créer les fichiers « administrateur.php » et « connectionb.php ».

Ils contiennent respectivement les répertoires de l'installation et les paramètres de la connexion à la base de données. Si les fichiers sont créés, vous obtenez l'écran suivant ([Image 14](#)). Vous pouvez trouver ces fichiers dans le sous-répertoire « script » de votre environnement L-g-Chimio.



Image 14 : Création des fichiers de configuration

Si les fichiers ne sont pas créés, alors vous obtenez l'écran de l'[Image 15](#). Vous devez vérifier les droits d'accès au sous-répertoire « script », qui doit être autorisé en écriture (voir chapitre I.B.3).

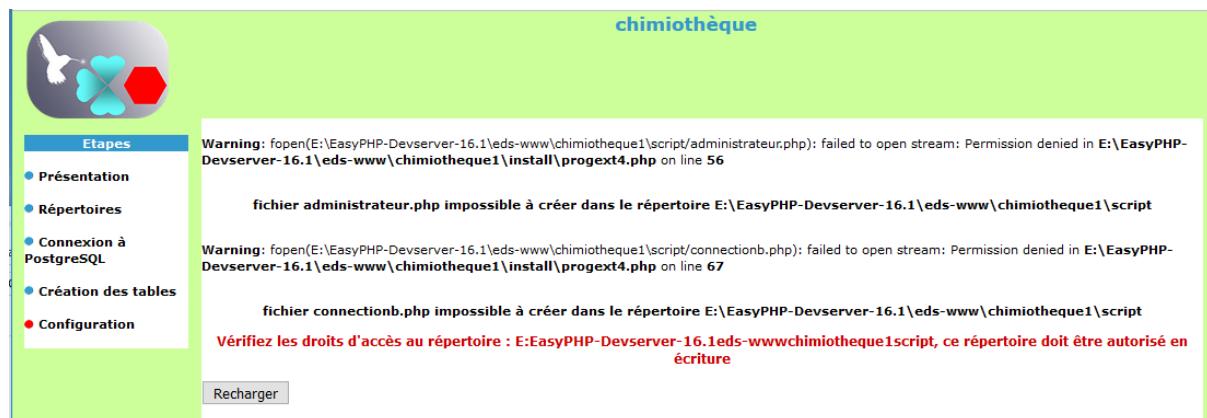


Image 15 : Problème à la création des fichiers

5. CINQUIEME ETAPE

Cette étape permet de sécuriser le sous-répertoire script qui contient les paramètres de l'application. Celui-ci est ouvert en écriture suite aux étapes précédentes. Pour la création des fichiers, ce répertoire doit maintenant être verrouillé en lecture seulement. S'il n'est pas verrouillé, vous obtenez l'écran de l'[Image 16](#), sinon vous avez l'écran de l'[Image 17](#).



Image 16 : Répertoire non verrouillé en lecture seulement



Image 17 : Répertoire bien verrouillé en lecture seulement

Pour verrouiller le répertoire « script » sous linux utilisez la commande chmod.

Exemple :chmod 555 /var/www/html/chimiotheque/script

6. SIXIEME ETAPE

Cette étape (Image 18) permet de définir les paramètres du laboratoire qui seront affichés pour la personnalisation.

Le fichier du logo ne doit pas excéder la taille de 19,53 Ko, il peut-être du type : jpg, gif ou png.



chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres

Nom du Laboratoire :

Acronyme du laboratoire :

Charger le logo du laboratoire : Aucun fichier sélectionné. [?](#)

Adresse à utiliser par l'application pour envoyer les courriels :

Soumettre

Image 18 : Étape N°6

L'adresse courriel à renseigner est celle qui servira pour l'envoi par l'application, des courriels automatiques. Exemple d'adresse : intranet.icoa@univ-orleans.fr ([Image 19](#)).



chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres

Nom du Laboratoire : Institut de Chimie Organique et Analytique

Acronyme du laboratoire : ICOA

Charger le logo du laboratoire : logo.gif [?](#)

Adresse à utiliser par l'application pour envoyer les courriels : intranet.icoa@univ-orleans.fr

Soumettre

Image 19 : Exemple de remplissage

7. SEPTIEME ETAPE

Cette étape finale ([Image 20](#)) permet de définir le compte du chimiothécaire (administrateur). Vous devez remplir tous les champs ([Image 21](#)) pour créer ce compte. Si vous avez une erreur dans la confirmation du mot de passe, le champ est cerclé d'une ligne rouge ([Image 22](#)).



chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres
- Compte

Compte du Chimiothécaire

Nom :

Prénom :

Courriel :

Langue :

Saisissez votre mot de passe (10 caractères minimum) :

Password Confirm Password

Image 20 : Page pour la création du compte chimiothécaire ou administrateur


chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres
- Compte

Compte du Chimiothécaire

Nom : ROBIN

Prénom : Laurent

Courriel : laurent.robin@univ-orleans.fr

Langue : fr

Saisissez votre mot de passe (10 caractères minimum) :

***** *****

Image 21 : Crédit de la page pour la création du compte chimiothécaire ou administrateur



chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres
- Compte

Compte du Chimiothécaire

Nom : ROBIN

Prénom : Laurent

Courriel : laurent.robin@univ-orleans.fr

Langue : fr

Saisissez votre mot de passe (10 caractères minimum) :

Soumettre

Image 22 : Erreur de confirmation du mot de passe

8. ÉTAPE FINALE

Votre installation (Image 23) est désormais finalisée.



chimiothèque

Etapes

- Présentation
- Répertoires
- Connexion à PostgreSQL
- Création des tables
- Configuration
- Droits d'accès
- Paramètres
- Compte
- Fin

Installation

Vous avez réussi l'installation du système de gestion de chimiothèque, **vous devez maintenant supprimer le répertoire E:\EasyPHP-Devserver-16.1\eds-www\chimiotheque1\install sur le serveur.**

[Aller à l'entrée du site](#)

Image 23 : Page finale de l'installation

Vous devez désormais supprimer le répertoire « install » sur le serveur web. Maintenant, vous pouvez vous connecter normalement sur votre application :

http://mon_site_web/chimiotheque/

D. PARAMETRAGES

Tous les administrateurs ont accès aux paramétrages de l'application via le menu administration de l'application. Vous avez quatre types de paramètres : Généraux, Produits, Exportation et Maintenance. Pour accéder au paramétrage, vous devez vous connecter à l'application (voir chapitre II.A).

1. GENERAUX

Dans l'onglet « Généraux » de la section paramétrage, vous retrouvez les informations relatives au laboratoire ([Image 24](#)) que vous avez entrées à l'installation. Grâce à cette section, vous pouvez les modifier.

[Image 24 : Paramétrage des informations du laboratoire](#)

La sous-section « champs obligatoires » vous permet de choisir quels champs devront être obligatoirement renseigné lors de la saisie ou de la modification des produits.

2. PRODUITS

Cette section permet de définir la masse minimum du stockage en pilulier de vos produits.

Par défaut, elle est initialisée à 1mg. En dessous de cette valeur, le produit est considéré comme non stocké. Toutefois, ce dernier est utilisable en Modélisation Moléculaire. En effet, la structure chimique peut être utilisée pour effectuer des criblages virtuels. Les informations sur le produit sont la mémoire du laboratoire. **Tout produit est un savoir-faire propre au laboratoire.**

Vous pouvez paramétriser la numérotation des piluliers, soit en **manuel** soit en **automatique**.

En manuel, (Image 25) lors de la saisie d'un produit sur la deuxième page de la saisie apparaît un champ permettant de renseigner le numéro du pilulier qui va contenir le produit saisi.



Attention en utilisant le mode manuel certaines fonctionnalités de L-g-Chimio ne vous seront pas accessibles.

Image 25 : Numérotation des piluliers en manuel

Si vous utilisez la numérotation automatique des piluliers (**ce que je vous recommande**), vous avez à définir votre type de numérotation grâce à un ensemble de menus (Image 26).

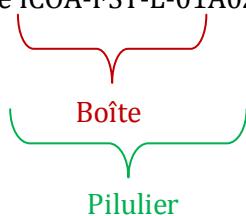
Deux types de numéros sont à établir, celui de stockage du produit et celui du produit sans masse de stockage (*masse inférieure à la valeur minimum de stockage définie au-dessus*). Si la masse du produit entrée est inférieure à la masse minimum de stockage alors cette dernière numérotation est utilisée. Cela permet d'avoir des produits pour mémoire et pour le criblage virtuel dans votre chimiothèque sans les avoir en stock. Toutefois, un stock peut être ajouté à postérieur.

Image 26 : Menus pour la numérotation automatique

Exemple de définition d'une numérotation automatique : celle de l'ICOA ([Image 27](#)) est constituée d'une partie fixe : ICOA, d'un tiret, de l'initiale/numéro d'équipe, d'un tiret, du type de la molécule (*libre, sous contrat, breveté*), d'un tiret, du numéro de la boîte dans la série et du numéro de la position du pilulier dans la boîte. Pour un numéro sans stockage physique : exemple celui de l'ICOA est constitué d'une partie fixe : ICOA, d'un tiret, de l'initiale/numéro d'équipe, d'un tiret, du type de la molécule (*libre, sous contrat, breveté*) et d'un numéro incrémental de 1 à ∞ .

Exemples :

- Numéro de pilulier de stockage ICOA-FST-L-01A02



- Numéro de produit sans stockage physique ICOA-FST-L-99

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. On the left, a sidebar titled 'Administration' includes links for Plaques, Résultats Bio, Exportation, Utilisateurs, and Paramètres. The main area is titled 'Numérotation de chaque produit' (Product numbering). It has two sections: 'Composition du numéro des produits stockés:' (Composition of the number for stored products) and 'Composition du numéro des produits non stockés:' (Composition of the number for non-stored products). Both sections have dropdown menus for 'Caractères fixes' (Fixed characters) set to 'ICOA'. Below these are several dropdown menus for 'Initiales ou numéro d'équipe' (Initials or team number), 'Type de molécule' (Molecule type), 'Numéro de la boîte' (Box number), and 'Coordonnées dans la boîte' (Coordinates in the box). The 'Stockés' section shows the template 'ICOA-EEEE-L-11111111' and the 'Non stockés' section shows 'ICOA-EEEE-L-11A02'. A 'Soumettre' (Submit) button is at the bottom.

Image 27 : Exemple de la définition d'un numéro

3. EXPORTATION

Dans l'onglet « Exportation » vous pouvez paramétriser l'adresse courriel d'exportation du fichier SDF lorsque vous cliquez sur le bouton sur la page « Exportation » du menu « Administration » voir chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable..** Vous pouvez également choisir quel type de numéro vous aurez dans le fichier d'exportation SDF. Soit le numéro de pilulier, soit le numéro unique permanent aléatoire à 8 chiffres (voir [Image 28](#)).

The screenshot shows the 'Chimiothèque' interface with the 'Institut de Chimie Organique et Analytique' logo. The top navigation bar includes 'Généraux', 'Produits', 'Exportation' (which is highlighted in red), and 'Maintenance'. The left sidebar under 'Administration' lists 'Plaques', 'Résultats Bio', 'Exportation', 'Importation', 'Utilisateurs', and 'Paramètres'. The main content area is titled 'Exportation' and contains fields for 'Courriel de la Chimiothèque Nationale' (set to 'db@chimiotheque-nationale.ensm.fr') and 'Numérotation utilisée pour l'exportation' (with options for 'Numéro standard défini par la chimiothèque' and 'Numéro aléatoire à 8 chiffres', with the latter selected). A 'Soumettre' (Submit) button is at the bottom. The bottom right corner of the page has the text 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 28 : vue de l'onglet exportation



Attention si vous avez choisi la numérotation automatique, la numérotation d'une substance est susceptible d'être modifiée par le système si la masse de stockage tombe à 0. Je vous conseille donc d'utiliser pour vos échanges avec vos partenaires la numérotation unique permanente à 8 chiffres.

4. MAINTENANCE

Dans cet onglet, vous pouvez vérifier que les dossiers et fichiers sensibles ont bien les autorisations ou droits adéquates.

Si tous les fichiers et répertoires sont cochés en vert, comme l'[Image 29](#), cela signifie que tout est bon. Par contre, si vous avez une croix rouge, comme l'[Image 30](#) vous devez revoir les autorisations sur le répertoire ou le fichier correspondant. Le répertoire « temp » doit être autorisé en écriture alors que le répertoire « script » et les fichiers « administrateur.php », « connectionb.php » et « secure.php » doivent être en lecture seule.

Pour rendre le sous-répertoire « script » ainsi que leurs fichiers en lecture seule :

- Sous Linux avec la commande chmod.
Exemple : chmod 555 /var/www/html/chimiotheque/script
- Sous Windows, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le(s) répertoire(s), puis sur « propriétés », cochez la case lecture seule, puis cliquez sur « Appliquer ». Dans la nouvelle fenêtre, choisissez d'appliquer les modifications à ce dossier et à tous les sous-dossiers et fichiers.

| Vérification des autorisations sur les répertoires |
|---|
| /var/www/html/app/chimiotheque/temp/ ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/ ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/administrateur.php/ ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/connectionb.php/ ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/secure.php/ ✓ |

Vider le répertoire temporaire
Il y a 1 fichiers temporaires dans le répertoire : /var/www/html/app/chimiotheque/temp/
[Vider le répertoire](#)

[Image 29 : Bonne configuration des fichiers](#)

The screenshot shows a software application window titled "Chimiothèque" from the "Institut de Chimie Organique et Analytique". On the left, there's a sidebar with a logo and a navigation menu including "Home", "Salles", "Modifications", "Rechercher", "Compte", "Déconnexion", "Administration", "Répertoires", "Résultats Bio", "Exportation", "Importation", "Utilisateurs", and "Paramètres". The main area displays a table titled "Vérification des autorisations sur les répertoires" with the following data:

| Répertoire | Autorisation |
|--|--------------|
| /var/www/html/app/chimiotheque/temp/ | ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script | ✗ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/administrateur.php | ✗ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/connections.php | ✓ |
| /var/www/html/app/chimiotheque/script/secure.php | ✗ |

Below the table, a message says "Il y a 2 fichiers temporaires dans le répertoire : /var/www/html/app/chimiotheque/temp/" followed by a "Vider le répertoire" button. The bottom right corner of the window has a copyright notice: "Copyright Laurent ROBIN, CvlS - Université d'Orléans 2011".

Image 30 : Exemple de fichiers n'ayant pas les bonnes autorisations

E. UTILISATEURS

Cette section est accessible uniquement aux administrateurs. Elle permet de gérer les utilisateurs ayant accès à l'application.

Tout compte chimiste ayant été activé il y a plus d'un an, sera automatiquement désactiver.

1. VISUALISER

Cet onglet permet de visualiser l'ensemble des utilisateurs du logiciel (Image 31). Vous avez la possibilité de les classer par nom, autorisation, responsable ou équipe en cliquant sur le mot clé correspondant. Le « statut » donne l'information sur l'état du compte :

-  : compte utilisateur désactivé
 -  : compte utilisateur en fonction.

La colonne « retour » affiche l'information pour la personne (*responsable ou chef uniquement*) si elle accepte de recevoir un courriel à chaque entrée d'un produit par un utilisateur de son équipe. Le ou les administrateurs reçoivent un courriel pour chaque entrée.

| Chimiothèque | | | | | | | | | | | |
|--|-----------------|---------|----------|---------------|---------|--------|--------|--------------|------------------------|-----------------|--------|
| Institut de Chimie Organique et Analytique | | | | | | | | | | | |
| Visiteur | Agent | Délégué | Reacteur | Modifications | Équipes | Rétoir | Langue | Autorisation | Responsable | Équipe | Statut |
| Saraie | | | | | | - | fr | Chimiste | Pascal BOUYSOU | Gilaizeau | Actif |
| Modifications | | | | | | - | fr | Chimiste | Delphine LOPIN | Gilaizeau | Actif |
| Rechercher | | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| Compte | | | | | | - | fr | Chimiste | François SUZENET | Suzenet | Actif |
| Désconnection | | | | | | - | fr | Chimiste | François SUZENET | Suzenet | Actif |
| Administration | | | | | | | | | | | |
| Paramètres | | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| Préparations | | | | | | - | fr | Chimiste | Hélène BERTHELOT | Berteira-Raboin | Actif |
| Réactus Bio | | | | | | Oui | fr | Responsable | Agathe DELMAS | Gilaizeau | Actif |
| Exportation | | | | | | - | fr | Chimiste | Patrick RAVETTA | Agrofoglio | Actif |
| Importation | | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| Utilisateurs | | | | | | - | fr | Chimiste | Marie SCHÜLER | Tatbouet | Actif |
| Paramètres | | | | | | - | fr | Chimiste | François SUZENET | Suzenet | Actif |
| AYARI | Mohamed | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| AYEYA | Benjamin | | | | | - | fr | Chimiste | Sabine BERTIERA-RABOIN | Berteira-Raboin | Actif |
| BAUDRAT | Edouard | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| BANDOL | Manonika | | | | | - | fr | Chimiste | Hélène BERTHELOT | Berteira-Raboin | Actif |
| Bardin-Ferreira | Veronique | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| Barroca | Nadine | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| BASSI | Carine | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| BASSOUDI | Ibtissam | | | | | - | fr | Chimiste | Sabine BERTIERA-RABOIN | Berteira-Raboin | Actif |
| BELAROUSKI | Rabea | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| BELLAL | Hélène | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| Bérénice | Valérie | | | | | Oui | fr | Responsable | Sylvain ROUTIER | Edinbeau | Actif |
| BEN JAMAA | Abdelhalek | | | | | - | fr | Chimiste | Karen PLE | Routier | Actif |
| BEN-OTMAN | Raja | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| BEN-YAHIA | Selim | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| BEN-YAHIA | Ali | | | | | - | fr | Chimiste | François SUZENET | Suzenet | Actif |
| BERINI | Christophe | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| BERNARD-MARTINEZ | maria del pilar | | | | | - | es | Chimiste | Marie SCHÜLER | Tatbouet | Actif |
| BERTIERA-RABOIN | Sabine | | | | | Oui | fr | Responsable | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| Bertheau | Aurélie | | | | | - | fr | Chimiste | Sabine BERTIERA-RABOIN | Berteira-Raboin | Actif |
| BERTHO | Sylvain | | | | | - | fr | Chimiste | Pascal BOUYSOU | Gilaizeau | Actif |
| BESTVINA | Emile | | | | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | Actif |
| BESSIERES | Maxime | | | | | - | fr | Chimiste | Vincent ROY | Agrofoglio | Actif |
| BIELLA | Anna | | | | | - | es | Chimiste | Estelle GALLIENNE | Martin | Actif |
| BIEFFEAU | Nicolas | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| BLIN | Hélène | | | | | - | fr | Chimiste | Christel LOPIN | Lopin | Actif |
| BLU | Mérimée | | | | | - | fr | Chimiste | Pascal BOUYSOU | Gilaizeau | Actif |

Image 31 : page permettant la visualisation des utilisateurs

2. AJOUTER

Pour créer les équipes, vous devez tout d'abord ajouter les responsables.

A leur création, apparaissent alors deux champs : l'un permet de donner un nom d'équipe et le deuxième permet de définir un numéro ou des initiales d'équipe. C'est ce dernier champ, qui est utilisé dans la numérotation (voir chapitre I.D.2). Pour créer un utilisateur, l'intégralité des champs doit être renseignée. Quand vous sauvegardez votre saisie, un courriel automatique est envoyé à cet utilisateur avec son login et mot de passe.

Afin que l'envoi de courriel automatique soit effectué correctement, vérifiez la configuration de PHP dans la section « Mail function » du fichier « php.ini » sur votre serveur.

The screenshot shows the 'Chimiothèque' application interface. On the left, there's a sidebar with a logo and a navigation menu under 'Administration' containing links like 'Saisie', 'Modifications', 'Rechercher', etc. The main area has tabs at the top: 'Visualiser', 'Ajouter' (which is active), 'désactiver', 'Réactiver', 'Modifications', and 'Équipes'. The 'Ajouter' tab is open, showing fields for 'Nom' (MARTIN), 'Prénom' (Franck), 'Courriel' (franck.martin@univ-orleans.fr), 'Langue' (fr), 'Statut' (Responsable), and 'Équipe' (dropdown menu showing 'Sélectionnez une équipe --'). There's also a section for 'Nouvelle équipe:' with 'martin' in the input field and 'Initiales ou numéro de l'équipe:' with 'MF' in the input field. A button 'Étape suivante ou Sauvegarde' is at the bottom. The footer includes the L-g-Chimio 1.4 logo and copyright information: 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 32 : Crédation d'un responsable

Pour définir les chimistes rattachés à une équipe, dans le menu déroulant « Statut » vous sélectionnez « chimiste ». Un menu apparaît permettant de sélectionner l'équipe d'appartenance de cette personne et son responsable de rattachement.

This screenshot shows the same application interface as the previous one, but with different data entered. The 'Ajouter' tab is still active. The 'Nom' field now contains 'HIEBELLE', 'Prénom' contains 'Lucie', 'Courriel' contains 'lucie.hiebelle@univ-orleans.fr', 'Langue' is 'fr', 'Statut' is 'Chimiste', and 'Équipe' is 'Martin'. In the 'Responsable' dropdown, 'Cyril NICOLAS' is selected. A 'Sauvegarder' button is at the bottom. The footer information is identical to the previous screenshot.

Image 33 : Crédation d'un chimiste

Une fois que vous avez créé les responsables et les chimistes, vous pouvez créer les chefs.

Un chef peut avoir plusieurs responsables et plusieurs équipes. Quand vous sélectionnez « Chef » dans le menu déroulant « Statut » apparaît le champ « Responsable ». Vous pouvez sélectionner/désélectionner un ou plusieurs responsables en utilisant la touche Alt Gr de votre clavier + clique droit de la souris.

Image 34 : Crédit d'un responsable

Pour résumer, vous avez la hiérarchie suivante :

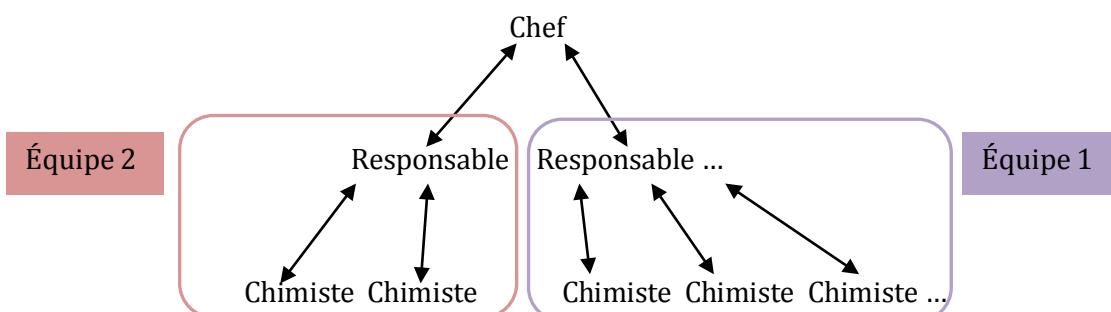


Image 35 : Hiérarchie des droits

3. DESACTIVER

Cette section permet de désactiver une personne, c'est-à-dire de supprimer son autorisation d'accès à la chimiothèque de façon temporaire ou à long terme. Il vous suffit de cliquer sur « Désactiver » en face du nom correspondant ([Image 36](#)). La personne n'est pas supprimée de la base, cela supprime simplement son autorisation d'accès.

| Chimiothèque | | | | | | | | | |
|--|---------------|---------------------------------------|---------|------------|--------------|-----------------|------------|--------|------------|
| Institut de Chimie Organique et Analytique | | | | | | | | | |
| Menu | | Visualiser | Ajouter | désactiver | Réactiver | Modifications | Équipes | | |
| Nom | Prénom | Courriel | Retour | Langue | Autorisation | Responsable | Équipe | Statut | |
| ABDALLAH | Wejden | wejden.abdallah@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Pascal BOUYSOU | Gillaizeau | | Désactiver |
| AGROFOGLIO | Luigi | luigi.agrofoglio@univ-orleans.fr | Oui | fr | Chef | - | | | Désactiver |
| AUCAGNE | Vincent | aucagne@cnrs-orleans.fr | Oui | fr | Responsable | Agnès DELMAS | Delmas | | Désactiver |
| AYARI | Mohamed-Ghazi | mohamed/ayari@etu.univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Patrick FAVETTA | Agrofoglio | | Désactiver |
| AYELA | Benjamin | benjamin.ayela@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Chrystel LOPIN | Lopin | | Désactiver |
| BELAROUESSI | Rabia | rabia.belaroussi@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | | Désactiver |
| BEN JAMAA | Abdelkhalek | abdelkhalek.ben-jamaa@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Karen PLE | Routier | | Désactiver |

[Image 36 : Fenêtre de désactivation d'un compte](#)

4. REACTIVER

Cette section permet de réactiver un compte précédemment désactivé. La personne pourra de nouveau se connecter avec son login et mot de passe, s'il n'y a pas de changement de ceux-ci. Pour réactiver un compte, il vous suffit de cliquer sur « Réactiver » en bout de ligne en face du nom ([Image 37](#)).

| Chimiothèque | | | | | | | | | |
|--|--------------|-------------------------------------|---------|------------|--------------|-----------------------|-----------------|--------|-----------|
| Institut de Chimie Organique et Analytique | | | | | | | | | |
| Menu | | Visualiser | Ajouter | désactiver | Réactiver | Modifications | Équipes | | |
| Nom | Prénom | Courriel | Retour | Langue | Autorisation | Responsable | Équipe | Statut | |
| ADIHOU | Hélène | helene.adihou@cnrs-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Delmas | | | Réactiver |
| AIT-MOHAND | katia | katia.ait-mohand@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Chrystel LOPIN | Lopin | | Réactiver |
| AKSSIRA | Mohamed | rajaa.boulahjar@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Suzenet | | Réactiver |
| Alphonse | France-Aimée | | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Suzenet | | Réactiver |
| Amblard | Franck | | - | fr | Chimiste | Isabelle I-Gillaizeau | I-Gillaizeau | | Réactiver |
| Amine | Safiyat | | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Suzenet | | Réactiver |
| Antoine | Maud | | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Routier | | Réactiver |
| ARNOULD | Mathieu | mathieu.arnould@etu.univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Marie-Aude HIEBEL | Berteina-Raboin | | Réactiver |
| Badarau | Eduard | | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Suzenet | | Réactiver |

[Image 37 : Fenêtre de réactivation d'un compte](#)

5. MODIFICATION

Grâce à cette section, vous pouvez modifier l'ensemble des paramètres de l'utilisateur sauf le mot de passe. Il vous suffit de cliquer sur modifier en bout de ligne en face du nom ([Image 38](#)).

| Nom | Prénom | Courriel | RetourLangue | Autorisation | Responsable | Équipe | Statut |
|------------|---------------|-------------------------------------|--------------|--------------|-------------|-----------------------|---|
| ABDALLAH | Wejden | wejden.abdallah@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Pascal BOUYSOU | Modifier |
| ADJHOU | Hélène | helene.adjhou@cnrs-orleans.fr | - | fr | Chimiste | - | Modifier ; Supprimer |
| AGROFOLIO | Luigi | luigi.agrofoglio@univ-orleans.fr | Oui | fr | Chef | - | Modifier |
| AIT-MOHAND | katia | katia.ait-mohand@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Chrystel LOPIN | Modifier |
| AKSSIRA | Mohamed | raja.boulahjar@univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Modifier ; Supprimer |
| Alphonse | France-Almée | | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Modifier |
| Amblard | Frank | | - | fr | Chimiste | Isabelle I-Gillaizeau | Modifier ; Supprimer |
| Antoine | Sébastien | | - | fr | Chimiste | I-Gillaizeau | Modifier |
| Antoine | Maud | | - | fr | Chimiste | Franck SUZENET | Modifier |
| ARNOULD | Mathieu | mathieu.arnould@etu.univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Frédéric BURON | Modifier |
| AUCAGNE | Vincent | aucagne@cnrs-orleans.fr | Oui | fr | Responsable | Marie-Aude HIEBEL | Modifier ; Supprimer |
| AYARI | Mohamed-Ghazi | mohamed.ayari@etu.univ-orleans.fr | - | fr | Chimiste | Agnès DELMAS | Modifier |
| | | | | | | Patrick FAVETTA | Modifier |

Image 38 : Modification des utilisateurs

Si la personne n'a pas de substances associées à son compte alors vous avez également la possibilité de supprimer définitivement ce compte.

6. ÉQUIPES

Dans cette partie, vous pouvez créer une équipe en insérant le nom puis les initiales/numéros. Ce dernier champ sera utilisé pour la numérotation automatique des molécules (*Image 39*).

| Équipe | Initiales ou numéro de l'équipe | Modifier |
|-----------------|---------------------------------|---|
| Agrofoglio | LAO | Modifier |
| Bénéteau | VBU | Modifier |
| Berteina-Raboin | SBR | Modifier |
| Bouyssou | PBU | Modifier |
| Chenault | JCT | Modifier |
| Compain | PCN | Modifier |
| Delmas | VAE | Modifier |
| Desvergne | VDS | Modifier |
| DesvergneANR | VDE | Modifier |
| Gillaizeau | IGU | Modifier |
| Guillaumet | GGT | Modifier |
| I-Gillaizeau | IGT | Modifier |
| Joseph | BJH | Modifier |
| Lopin | JCJ | Modifier |
| Martin | OMN | Modifier |
| Routier | SRR | Modifier |
| Suzenet | FST | Modifier |
| Tatibouët | ATT | Modifier |

Modifier une équipe

Ajouter une équipe

Nouvelle équipe :

Initiales ou numéro de l'équipe :

Soumettre

Modification

Ajout

Image 39 : Ajout et modification d'une équipe

Pour modifier une équipe, cliquez sur « modifier » en bout de ligne de celle-ci, puis modifiez les valeurs du champ et cliquez sur « soumettre » (*Image 40*).

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Équipes

| Équipe | Initiales ou numéro de l'équipe | Soumettre |
|-----------------|---------------------------------|-----------|
| Agrofoglio | LAO | |
| Boneteau | VBU | Modifier |
| Berteina-Raboin | SBR | Modifier |
| Bouyssou | PBU | Modifier |
| Chenault | JCT | Modifier |
| Compain | PCN | Modifier |
| Delmas | VDS | Modifier |
| Desvergne | VDE | Modifier |
| DesvergneSANR | IGU | Modifier |
| Gillaizeau | GGT | Modifier |
| Guillaumet | IGT | Modifier |
| I-Gillaizeau | BJH | Modifier |
| Joseph | JCJ | Modifier |
| Lopin | OMN | Modifier |
| Martin | SRR | Modifier |
| Routier | FST | Modifier |
| Suzenet | ATT | Modifier |
| Tatibouët | | |

Ajouter une équipe

Nouvelle équipe :

Initiales ou numéro de l'équipe :

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 40 : Modification d'une équipe

II. 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 41*) 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 42*). Sinon, vous retournez à l'authentification, avec la possibilité de redemander un mot de passe (*Image 43*) qui vous sera envoyé par courriel.

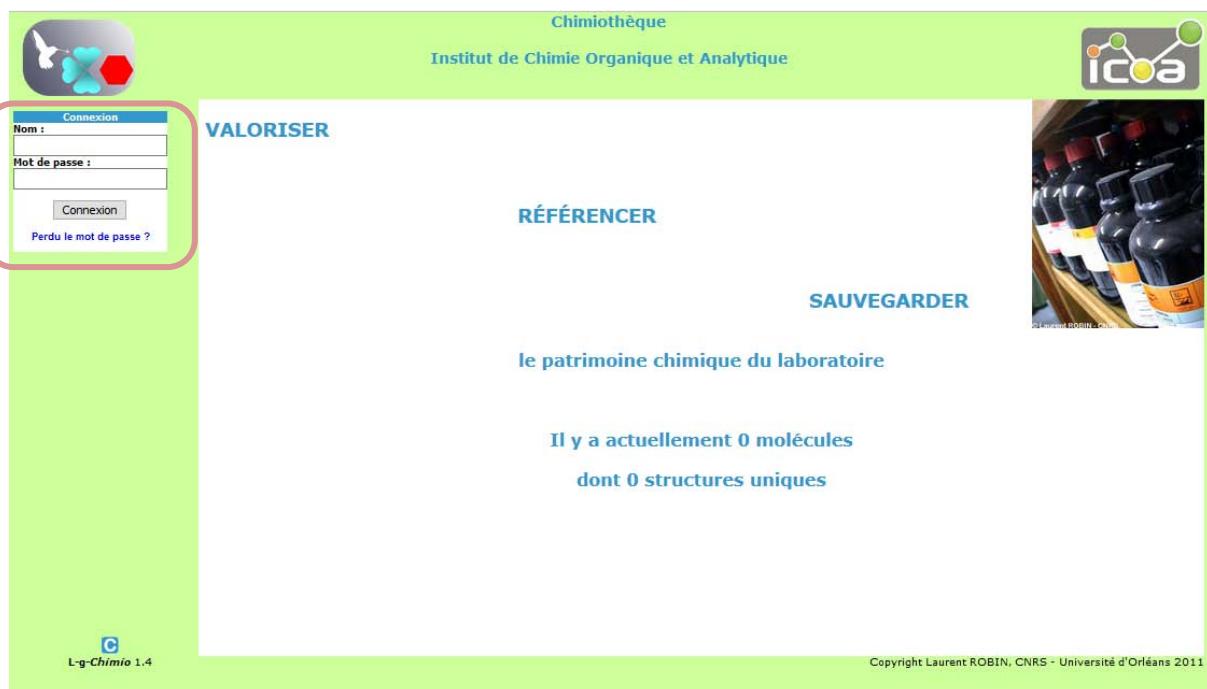


Image 41 : Connexion à l'application

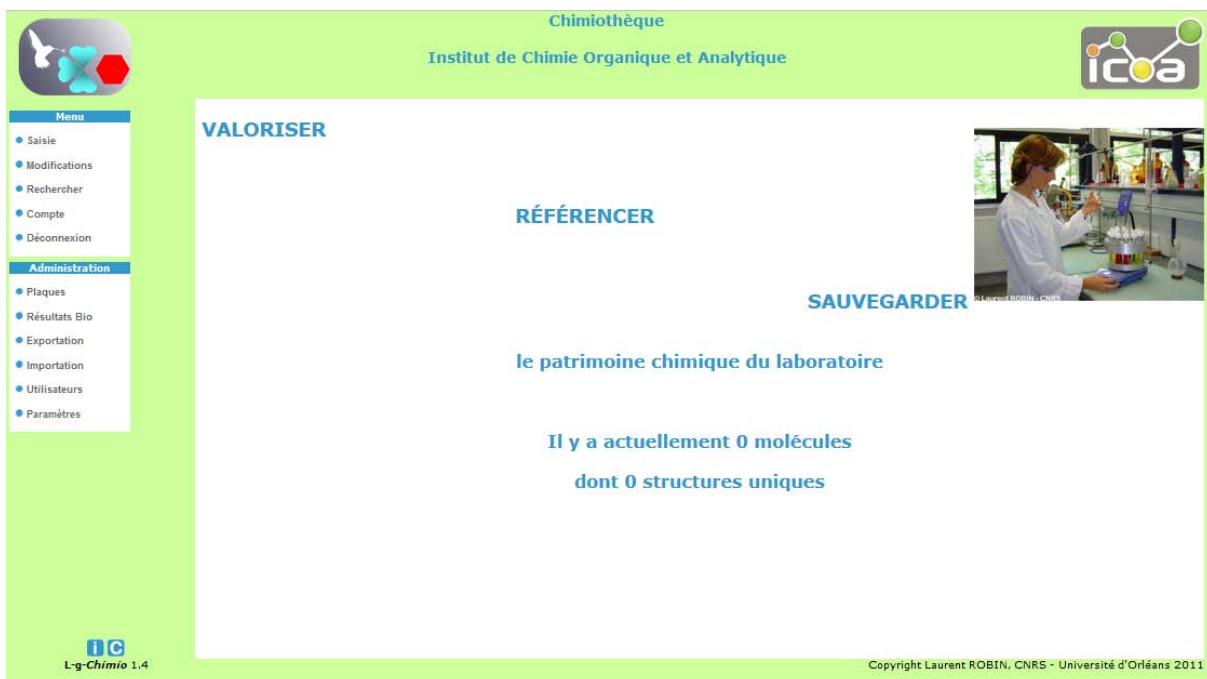


Image 42 : Authentification de l'utilisateur chimiothécaire/administrateur réussie

The screenshot shows the L-g-Chimio 1.4 software interface. At the top, there is a logo of a white dove above a stylized molecular structure, followed by the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". To the right is the ICOA logo. The main area has a light green background. On the left, there is a sidebar with a "Connexion" section containing fields for "Nom :" and "Mot de passe :", a "Connexion" button, and a link "Perdu le mot de passe ?". In the center, there are three buttons: "VALORISER", "RÉFÉRENCER", and "SAUVEGARDER". Below these buttons, there is a photograph of a person working at a computer in a laboratory setting. A text box in the center says "le patrimoine chimique du laboratoire". Below it, another text box says "Il y a actuellement 0 molécules" and "dont 0 structures uniques". At the bottom left, it says "L-g-Chimio 1.4" and at the bottom right, "Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011".

Image 43 : 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 44](#)) 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.**

The screenshot shows the password recovery page of the L-g-Chimio 1.4 software. At the top, there is a logo of a white dove above a stylized molecular structure, followed by the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". To the right is the ICOA logo. The main area has a light green background. On the left, there is a sidebar with a "Connexion" section containing fields for "Nom :" and "Mot de passe :", a "Connexion" button, and a link "Perdu le mot de passe ?". In the center, there is a form with a label "Votre adresse courriel :" followed by an input field and a "Soumettre" button.

Image 44 : 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 45](#)), 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.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

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

JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

Recommandations pour le dessin des structures

Note sur la configuration :

* : champ obligatoire

* Equipe --- Responsable :

* Origine de la molécule :

* Etape de synthèse de la molécule :

* Masse de produit disponible : mg

* Type de structure :

Champ apparaissant uniquement pour le(s) administrateur(s) et chef(s)

Soumettre

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

[Image 45 : 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 46).

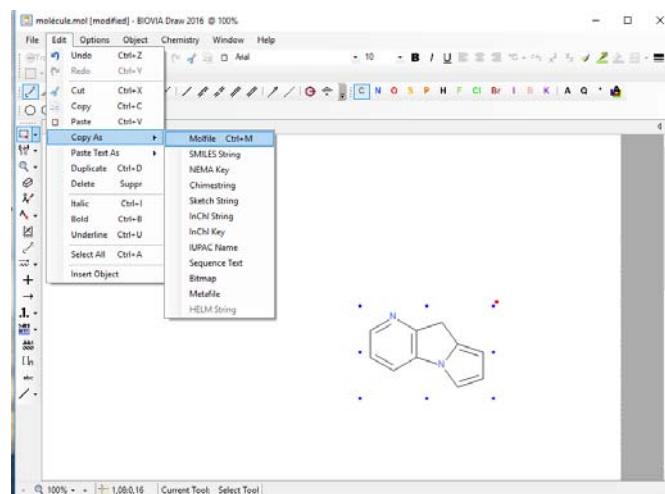


Image 46 : copier au format Mol votre structure à partir d'un logiciel de dessin de structure

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 47).

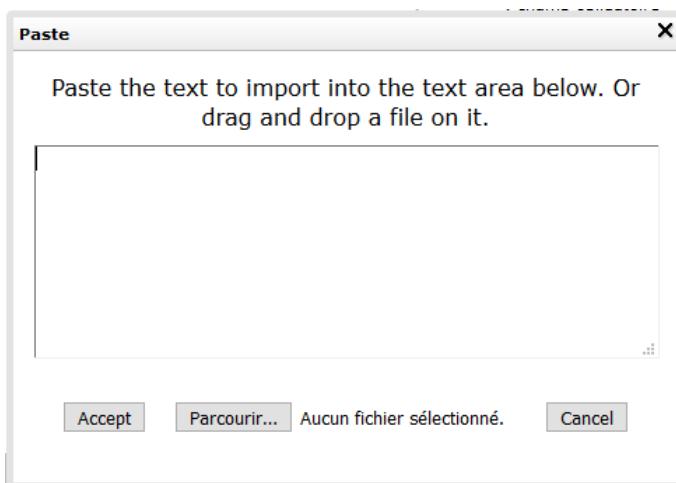


Image 47 : fenêtre de JSME ou coller votre texte au format Mol ou Smiles

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



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 ciblé 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 I.D.2), 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 48](#).

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

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

Champ apparaissant uniquement pour le(s) administrateur(s) et chef(s)

* : champ obligatoire

* Équipe --- Responsable : Chenault --- Jacques Chenault

* Origine de la molécule : synthèse

* Etape de synthèse de la molécule : molécule finale

* Masse de produit disponible : 9 mg

* Type de structure : Libre

Recommandations pour le dessin des structures

Note sur la configuration :

Soumettre

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

[Image 48 : Exemple de saisie](#)

2. DEUXIEME PAGE DE SAISIE.

Si vous avez mis la numérotation en automatique (Chapitre I.D.2), 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 49

A ce stade, vous pouvez encore modifier la masse. Si elle est en dessous du seuil adopté dans la section paramétrage (Chapitre I.D.2), (*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 I.D.2), 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 I.D.2.

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

ICOA

* : champ obligatoire

Numéro de pilulier : ICOA-JCT-L-04A03

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 :

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 UV

UV :

Fichier du spectre UV :
Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

Spectrométrie de Masse

SM :

Source d'ionisation :
-- Sélectionnez la source --

Fichier du spectre SM :
Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

Spectrométrie Infrarouge

IR :

Fichier du spectre IR :
Parcourir... Aucun fichier sélectionné.

mesure de l'alpha

dD : _____

Température :
_____ °C

Concentration :
_____ mol. L⁻¹

Solvant :
-- Sélectionnez le solvant : --

CCM :

Rf : _____

Solvants utilisés :

Chemical structure input:

SMILES: C1=CC=C(C=C1)CC[C@H]2C[C@H](CN2C)C

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. At the top, there are two main sections: 'Spectrométrie' and 'Spectrométrie RMN ¹³C'. Each section has a 'Données RMN' field (empty) and a 'Fichier du spectre' field (empty, showing 'Aucun fichier sélectionné'). Below these are fields for 'Publication' (DOI and HAL numbers), 'Observations' (empty), and a 'Soumettre' button. The bottom left corner shows the L-g-Chimio logo and version 1.4. The bottom right corner shows copyright information: 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 49 : 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 II.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 I.D.2),

- soit le numéro de la Chimiothèque Nationale (CN000000V) s'il a été importé par l'administrateur (Chapitre III.D.1).

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* (Image 35)

Le chimiste (Image 50) verra le champ « type de molécule » (*libre, sous contrat ou breveté*), le responsable (Image 51) verra le champ « type de molécule » et « collaborateurs » (*avec seulement les membres de son équipe*), le responsable (Image 52) 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.

Image 50 : Affichage vu par le type chimiste

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

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

type de molécule : -- Sélectionnez le type -- **et/ou** **collaborateurs :** -- Sélectionnez un collaborateur -- **Rechercher**

JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

Rechercher par : Structure exacte Sous structure Similarité - Coefficient de similarité : min 0 max 1 valeur: 0,6 **Rechercher**

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 51 : Affichage vu par le type responsable

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Menu

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

type de molécule : -- Sélectionnez le type -- **et/ou** **équipes :** -- Sélectionnez une équipe -- **ou** **collaborateurs :** -- Sélectionnez un collaborateur -- **Rechercher**

JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

Rechercher par : Structure exacte Sous structure Similarité - Coefficient de similarité : min 0 max 1 valeur: 0,6 **Rechercher**

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 52 : 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

(Image 35). Seul l'administrateur aura une vue sur l'ensemble des équipes définies dans la section I.E.6.

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 53).

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface for a search query. The top navigation bar includes the logo, menu items (Menu, Saisie, Modifications, Rechercher, Compte, Déconnexion), and the ICOA logo. A red box highlights the 'Changement de pages' button in the top right corner.

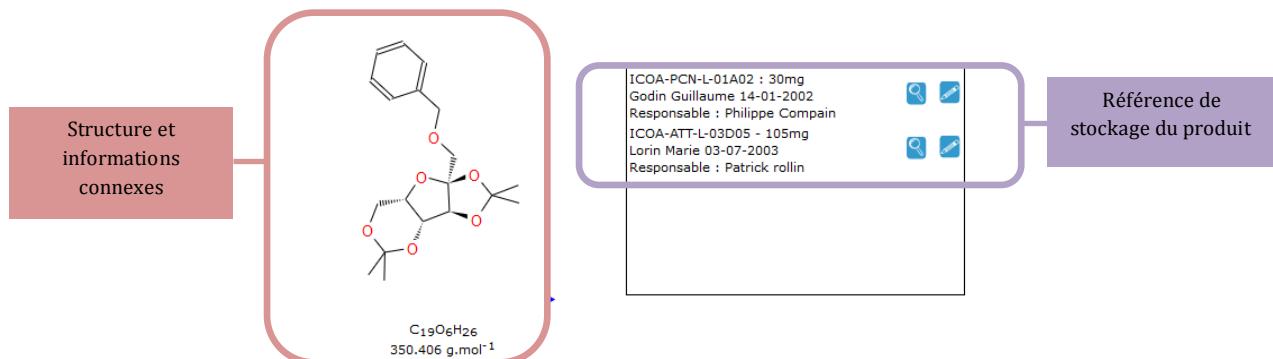
The main area displays search results for 202 responses across 26 pages. Each result card contains a chemical structure, its formula, and details about its entry:

- Page 1:**
 - C9H10O3, 166.062994186 g.mol⁻¹
 - C14H15NO3S, 277.077264041 g.mol⁻¹
 - C18H20N2O2S, 328.124548584 g.mol⁻¹
 - C10H8N2O2, 188.05857751 g.mol⁻¹
 - C26H22N2O6S, 490.119857136 g.mol⁻¹
 - C19H24N2O4, 344.173607266 g.mol⁻¹
 - C25H24N2O6S, 480.1355072 g.mol⁻¹
 - C18H18BrNO2S, 391.024162162 g.mol⁻¹
- Page 2:**
 - ICOA-IGU-L-02H04 : 10mg, GIGANT Nicolas 20-10-2011, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-04A02 : 5mg, GIGANT Nicolas 23-02-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-04G10 : 5mg, GIGANT Nicolas 03-07-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-02H08 : 5mg, GIGANT Nicolas 16-11-2011, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-04A10 : 5mg, GIGANT Nicolas 24-02-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-186 : 0mg, GIGANT Nicolas 28-03-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-04A08 : 5mg, GIGANT Nicolas 24-02-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU
 - ICOA-IGU-L-04F11 : 5mg, GIGANT Nicolas 02-07-2012, Responsable : Pascal BOUYSSOU

At the bottom, it says "Il y a 202 réponse(s) répartie(s) sur 26 page(s)" and includes "page 1", "page 2", and "Aller à la page". The footer also includes the copyright information: "Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011".

Image 53 : 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 54](#))

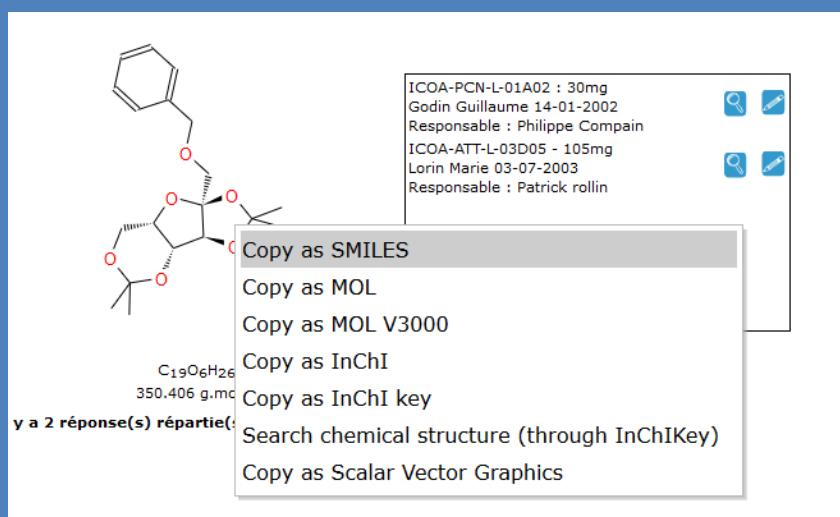


[Image 54 : Existence de deux fiches pour une même structure](#)

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 55](#)).



[Image 55 : 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 56: 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 57](#)), 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),
 - le numéro CAS (http://fr.wikipedia.org/wiki/Num%C3%A9ro_CAS),
 - le numéro HAL (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

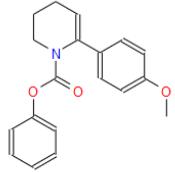
icoa

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 celloïne 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 DOI : Référence CAS : **numéro HAL :**

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

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
Vérifie 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,

*Image 57 : Onget "Structure"***b) ONGLET « ANALYSES »**

Dans l'onglet « Analyses », (Image 58), 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

Analyses

Pureté mesurée : %
Méthode de mesure de la pureté :

Spectrométrie UV :

Spectrométrie de Masse (ESI) :
SM (IS) : $m/z = 405,5$ [M+H]⁺.
Source d'ionisation :

Spectrométrie de Masse haute résolution :
HRMS (ESI) m/z : [M+H]⁺ calculée pour C₂₁H₂₈N₂O₆Na 427.1845 trouvée 427.1833.
Source d'ionisation :

RMN ¹H :
3.45 t 1H
3.46 s 1H
3.84 J 3H
3.86 s 6H
4.20 dd 1H
4.36 s 1H
4.64 s 2H
7.34 m 5H

Télécharger le fichier

RMN ¹³C :
153.12
138.27
138.10
137.95
128.31
127.63
127.40
109.99
76.62
73.20
60.65
59.57
55.77

Télécharger le fichier

Spectrométrie Infrarouge :
2956
1735
1589

Résultats Bio :
Température :
Concentration :
Solvant :

CCM :
RF :
Solvants utilisés :

Copyright Laurent ROBIN, CHRS - Université d'Orléans 2011

*Image 58 : 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 59](#)). Un résultat apparaît seulement s'il a été importé par l'administrateur grâce aux outils d'importation (voir : Chapitre III.D).

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. At the top, there is a logo with a stylized bird and a flower, followed by the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". On the right, there is a logo for "icoa". Below the header, there is a menu bar with "Structure" and "Analyses" tabs, and a "Commentaires" section. The main area displays a table with the following data:

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

A purple box highlights the "Nom de la cible" (Name of the target) field in the menu on the left. A red arrow points from the "P22303" entry in the table to a pink box labeled "Référence UniProt" (UniProt reference), which is located below the table.

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

[Image 59 : Onglet "résultats bio"](#)

En passant la souris sur le nom du test biologique, vous accédez aux détails ([Image 60](#)). Le numéro à côté du nom du test biologique ici P22303 sur [l'Image 60](#), 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.

The screenshot shows a software interface for 'Chimiothèque' at the 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. The main window displays a table of results for 'AchE humaine - P22303'. The table has columns for 'Cible' (Target), 'Actif' (Active), and 'Résultats' (Results). The 'Résultats' column includes fields for '% d'activité' (activity %), '% inhibition' (inhibition %), 'IC₅₀ en nM' (IC₅₀ in nM), 'EC₅₀ en nM' (EC₅₀ in nM), and 'Autre résultat' (other result). A red box highlights the 'Actif' column for this target. Below the table, a large green box contains detailed experimental information:

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 Pamlard (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 électrophoruse électrique (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 électrophoruse électrique 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.

Image 60 : affichage des détails du test biologique

d) ONGLET « HISTORIQUE »

Cet onglet n'est accessible qu'aux seuls administrateurs ([Image 61](#)). 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.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface for the 'Chimiothèque' (Chemical Library) at the 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. The left sidebar has a 'Menu' section with links like 'Saisie', 'Modifications', 'Rechercher', 'Compte', 'Déconnexion', and an 'Administration' section with 'Plaques', 'Résultats Bio', 'Exportation', 'Importation', 'Utilisateurs', and 'Paramètres'. The main content area is titled 'Modifications effectuées sur cette fiche' (Modifications made on this card). It lists a single modification entry:

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

At the bottom left is the L-g-Chimio logo, and at the bottom right is the copyright notice: 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 61 : 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 II.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 (Image 26) 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 : Image 27) peut intervenir uniquement si la masse passe au-dessus ou en dessous de la limite de stockage défini au chapitre I.D.2.

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 62](#)) 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 I.D.2), 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.

The screenshot shows the L-g-Chimio search interface. At the top, there's a navigation bar with the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". On the left, a sidebar titled "Menu" lists "Saisie", "Modifications", "Rechercher" (which is selected and highlighted in red), "Compte", and "Déconnexion". Below the sidebar is a logo for "iC" and "L-g-Chimio 1.4". The main search area contains several input fields and controls:

- Structure:** A JSME Molecular Editor interface with a toolbar above it containing icons for new, save, zoom, and various selection tools. To its right is a vertical column of element symbols: C, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, X.
- Masse molaire en g.mol⁻¹:** An input field with a dropdown menu and a checkbox labeled "exacte".
- Formule brute:** An input field with a checkbox labeled "exacte".
- Numérotation:** An input field with a question mark icon.
- Search Criteria:** A section titled "Rechercher par:" with three radio buttons: "Structure exacte" (selected), "Sous structure", and "Similarité - Coefficient de similarité : min 0 max". Below this is a note: "1 valeur: 0.6".
- Search Button:** A large blue "Rechercher" button at the bottom right.

At the very bottom of the interface, there's a copyright notice: "Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011".

[Image 62 : 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 II.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 63](#)).

| Structures | IC ₅₀ | EC ₅₀ | Actif/Inactif | % activité | % inhibition | Autre résultat | Commentaires |
|----------------------------------|------------------|------------------|---------------|------------|--------------|----------------|--------------|
| ICOA-PBU-L-01B02 99814424 | | | | | 32.8 | | |
| ICOA-PBU-L-02D06 54837099 | | | | | 50.3 | | |

[Image 63 : 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 64](#)). 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.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

GILLAIZEAU Isabelle

Votre adresse courriel : laurent.robin@univ-orleans.fr

Recevoir un courriel à chaque entrée d'une structure pour votre équipe : Oui Non

Langue : fr

Modifier le mot de passe :

Saisir le nouveau mot de passe (minimum 8 caractères) :

Confirmez le nouveau mot de passe :

Soumettre

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 64 : 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.

III. MANUEL D'ADMINISTRATION

Cette partie est réservée aux comptes ayant le droit d'administration sur l'application.

A. CREATION DES PLAQUES 96 PUITS

L'interface d'administration des plaques 96 puits ([Image 65](#)) permet de créer l'association plaques – produits de plusieurs manières.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface for creating a 96-well plate. The title bar includes the logo 'iCOA' and the text 'Chimiothèque' and 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. The left sidebar has a 'Menu' section with links to Saisie, Modifications, Rechercher, Compte, Déconnexion, and Administration. Under 'Administration', there are links to Plaques, Résultats Bio, Exportation, Importation, Utilisateurs, and Paramètres. The main area is titled 'Création' and contains fields for 'Date de création' (set to 08/11/2017), 'Mise en plaque d'une boîte de chimiothèque complète' (with dropdowns for 'Sélectionnez une Boîte' and 'Plaque "Fille" de la plaque "Mère" N°'), 'Nouveau lot d'appartenance' (empty input field), 'Numéro de la plaque à usage interne' (empty input field), 'Numéro de la plaque à usage externe' (empty input field), 'Solvant utilisé' (dropdown set to 'DMSO'), 'Volume de la plaque' (input field with 'mL' dropdown), and 'Masse de produit par puits' (dropdown set to 'Sélectionnez'). The bottom right corner of the interface displays the copyright notice 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 65 : Interface pour la création d'une plaque

Le premier champ « date de création » offre la possibilité d'entrer la date de création physique de la plaque. Il est initialisé avec la date du jour et est modifiable. Cette référence reste associée à la plaque, pour pouvoir effectuer un contrôle de pérennité de celle-ci.

Si vous êtes en numérotation automatique des piluliers (Chapitre I.D.2), vous pouvez directement sélectionner une boîte avec ses 80 molécules à mettre en plaque avec la correspondance directe des numéros de position (A02, A03,..., H11) entre la boîte et la plaque.

Comme vous pouvez hiérarchiser les plaques : plaques grand-mère, x plaques mères, x plaques filles ([Image 71](#)). Vous pouvez directement créer une plaque fille à partir d'une plaque mère en utilisant le champ « Plaque Fille de la plaque N° ». Elle aura la même disposition spatiale, ce sera la concentration qui va changer.

Le champ optionnel « Nouveau lot d'appartenance » permet de donner un numéro commun à un lot de plaques si l'on souhaite qu'elles ne soient pas dissociées pour les tests biologiques. Ce numéro de lot est exporté durant la création du fichier SDF utilisé pour le transfert de données vers la Chimiothèque Nationale.

Les champs « Numéro de la plaque à usage interne » et « Numéro de la plaque à usage externe » autorisent la saisie pour chaque plaque de son numéro identification. Le champ « Numéro de la plaque à usage interne » est le numéro exporté avec le fichier SDF vers la Chimiothèque Nationale. Le champ « Numéro de la plaque à usage externe » lui est réservé pour un usage vers d'autres structures que la CN. Ils ne sont pas automatiquement générés. Ils sont laissés à l'appréciation du chimiothécaire.

Le menu déroulant « Solvant utilisé » octroie la capacité de définir le solvant utilisé pour la mise en plaque. Il est initialisé avec le DMSO comme solvant par défaut. Les champs suivants permettent de renseigner le volume total du mélange par puits de la plaque.

Le menu déroulant « Masse de produit par puits » permet de définir si la masse de la substance dans le puits est basée sur une valeur moyenne ou exacte. Une fois cette sélection effectuée ([Image 66](#)) :

- Si vous avez choisi « Masse moyenne » deux nouveaux champs s'affichent, un permettant de noter la concentration moyenne par puits et l'autre la masse de produit par puits en mg.
- Si vous avez choisi « Masse exacte » dans la page suivante vous aurez la possibilité de saisir pour chaque puits la masse exacte de produit pesé.

Pour les deux sélections, vous avez la possibilité de défalquer directement du stockage des produits la masse du produit indiquée. Si la masse du produit tombe à zéro et que vous êtes en numérotation automatique (Chapitre I.D.2), alors le numéro local va changer pour un numéro local sans masse.

Image 66: exemple de remplissage du formulaire de création de plaques

Une fois le formulaire renseigné, cliquez sur le bouton « soumettre ». Vous arrivez à la page suivante, qui varie selon les choix effectués à la première page.

1. CREATION D'UNE PLAQUE A PARTIR D'UNE BOITE OU D'UNE AUTRE PLAQUE (PLAQUE MERE) EXISTANTE

Si vous avez choisi de créer une plaque à partir d'une boîte ou d'une plaque déjà existante, vous arrivez sur une deuxième page complètement renseignée avec pour chaque puits de la plaque la structure associée. La plaque est créée, vous arrivez sur une page qui sera informative dans ce cas. Elle est divisée en deux parties (Image 67).

La partie du haut représente une plaque. En passant la souris sur chaque puits, vous obtenez les informations sur le propriétaire, l'équipe, le numéro et le nom IUPAC de la structure.

Dans la partie basse, vous avez l'intégralité des molécules en 2D constituant la plaque (*vous pouvez cliquer sur chacune d'elles pour l'agrandir*). Vous pouvez retrouver la plaque ainsi créée avec toutes les informations dans l'onglet « gestion ».

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

ICOA

Menu

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

Création | Gestion

Numéro de la plaque à usage interne : ICOA-SRR-S-1
Numéro de la plaque à usage externe :

Concentration moyenne : 0.01 mM. L⁻¹
Volume de la plaque : 1 µL
Masse de produit par puits : 2 mg

Produit : Bouclier Bourdonnoux Aurélie ICOA-SRR-05HOS
9,10-diméthyl-4-oct-1-en-3-one,4-oxo-3,5-dihydro-4H-1,3-dioxolane-2,7(12),8,10,16,18,20-octaeine-3,5,13-trione

Copyright Laurent RUBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

L-g-Chimio 1.4

127.0.0.1/chimiotheque/creationplaque.php#

Image 67 : Deuxième page de la création de plaques – 1^{ère} possibilité

2. CREATION D'UNE PLAQUE EN DEFINISSANT CHAQUE PUITS

Si vous n'avez pas choisi de créer une plaque à partir d'une boîte ou d'une autre plaque alors vous avez un formulaire vous permettant d'associer pour chaque puits un produit. Pour effectuer cela vous avez trois possibilités (Image 68) :

- première partie du formulaire : vous cliquez sur chaque puits de la plaque et vous lui associez un produit
- deuxième partie du formulaire : vous utilisez un fichier du type CSV que vous téléchargez
- méthode mixte, par l'insertion d'un fichier CSV partiel, puis vous complétez puits par puits.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Création Gestion

Numéro de la plaque à usage interne :
ICOA-DIVERPRO-1
Numéro de la plaque à usage externe :

Concentration moyenne :
0.01 mol. L⁻¹
Volume de la plaque :
1 mL
Masse de produit par puits :
2 mg

Charger un fichier au format CSV :
Parcourir... Aucun fichier sélectionné. Sauvegarde ?

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

1ère partie du formulaire : insertion d'un produit puits par puits

2ème partie du formulaire : insertion des produits grâce à un fichier de type CSV

Image 68 : Deuxième page de la création de plaques - 2ème possibilité

a) CREATION PUITS PAR PUITS

En cliquant sur un puits, vous pouvez choisir la structure à associer ([Image 69](#)). Pour ce faire, vous choisissez l'équipe d'appartenance, le propriétaire et enfin le numéro de la molécule. Une fois ces étapes renseignées, la structure apparaît. Si vous avez sélectionné « masse exacte » dans la première page, un champ « Masse de ce produit dans le puits » apparaît où vous devez renseigner la masse du produit pour ce puits.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Equipes : Gillaizeau
Chimiste : GIGANT
Numéro d'identification : ICOA-IGU-L-02C04

Numéro de la plaque à usage interne : ICOA-DIVERPRO-2
Numéro de la plaque à usage externe :

Concentration moyenne : 0.01 mol. L⁻¹
Volume de la plaque : 1 mL
Masse de produit par puits : 2 mg

Charger un fichier au format CSV :
Parcourir... Aucun fichier sélectionné. Sauvegarde ?

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 69 : Association d'une structure à un puits de la plaque

Une fois la molécule sélectionnée, vous cliquez sur le bouton « Sauvegarde » afin de sauvegarder les données, ensuite vous pouvez passer au puits suivant.

A partir de ce moment, la deuxième partie du formulaire permettant de renseigner les données par l'intermédiaire d'un fichier CSV disparaît laissant la place à une représentation de la plaque 96 puits avec la structure dans le puits correspondant ([Image 70](#)).

Ce qui veut dire que vous devrez utiliser cette méthode pour les 80 puits.

Chimiothèque

Institut de Chimie Organique et Analytique

icoa

Création **Gestion**

Numéro de la plaque à usage interne :
ICOA-DIVERPRO-2
Numéro de la plaque à usage externe :

Concentration moyenne :
0.01 mol. L⁻¹
Volume de la plaque :
1 mL
Masse de produit par puits :
2 mg

2 3 4 5 6 7 8 9 10 11

A

B

C

D

E

F

G

H

L-g-Chimio 1.4

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 70 : Formulaire après le renseignement du premier puits

b) CREATION GRACE A UN FICHIER DE TYPE CSV

En utilisant un fichier de type CSV, il peut être généré à partir d'Excel ou d'un logiciel équivalent, vous pouvez insérer en totalité ou partiellement, la correspondance des produits avec les puits. Si vous êtes en masse exacte, vous pouvez également entrer celle-ci. Un fichier CSV est un fichier texte classique, mais avec les données formatées de la manière suivante dans ce cas :

- Sans la masse :
"numéro de position sur la plaque";"numéro du produit ou numéro constant"[retour à la ligne]

Voici un exemple de fichier simple sans masse exacte :

```
"A02";"ICOA-ATT-L-02E09"  
"A03";"ICOA-SRR-L-02A05"  
"A04";"ICOA-SRR-L-04C10"  
"A05";"ICOA-FST-L-05E05"  
"A06";"ICOA-JCJ-L-01C09"
```

- Avec la masse :
"numéro de position sur la plaque";"numéro du produit ou numéro constant";"masse (0.00 ou 0,00) en mg"[retour à la ligne]

Voici un exemple de fichier avec masse exacte en exprimée en mg :

```
"A02";"ICOA-ATT-L-02E09";"1"  
"A03";"ICOA-SRR-L-02A05";"0.9"  
"A04";"ICOA-SRR-L-04C10";"1.1"  
"A05";"ICOA-FST-L-05E05";"1.2"  
"A06";"ICOA-JCJ-L-01C09";"1"
```

Pour la numérotation du produit, vous pouvez utiliser indifféremment le numéro constant à 8 chiffres généré par l'application ou le numéro défini ([Image 26](#)).

Par l'intermédiaire de la deuxième partie du formulaire ([Image 68](#)), vous cliquez sur « Parcourir » pour pointer sur votre fichier CSV. Une fois celui-ci sélectionné, vous cliquez sur « télécharger ». La page est régénérée avec les données du fichier et vous obtenez l'ensemble de la plaque ([Image 67](#)).

c) METHODE MIXTE

Vous pouvez insérer un fichier CSV ne contenant pas les 80 puits. Vous pouvez compléter les informations par la première méthode puits par puits.

B. GESTION DES PLAQUES 96 PUITS

En cliquant sur l'onglet « Gestion », vous accédez à l'interface de gestion ([Image 71](#)) des plaques 96 puits que vous avez créés (Chapitre III.A).

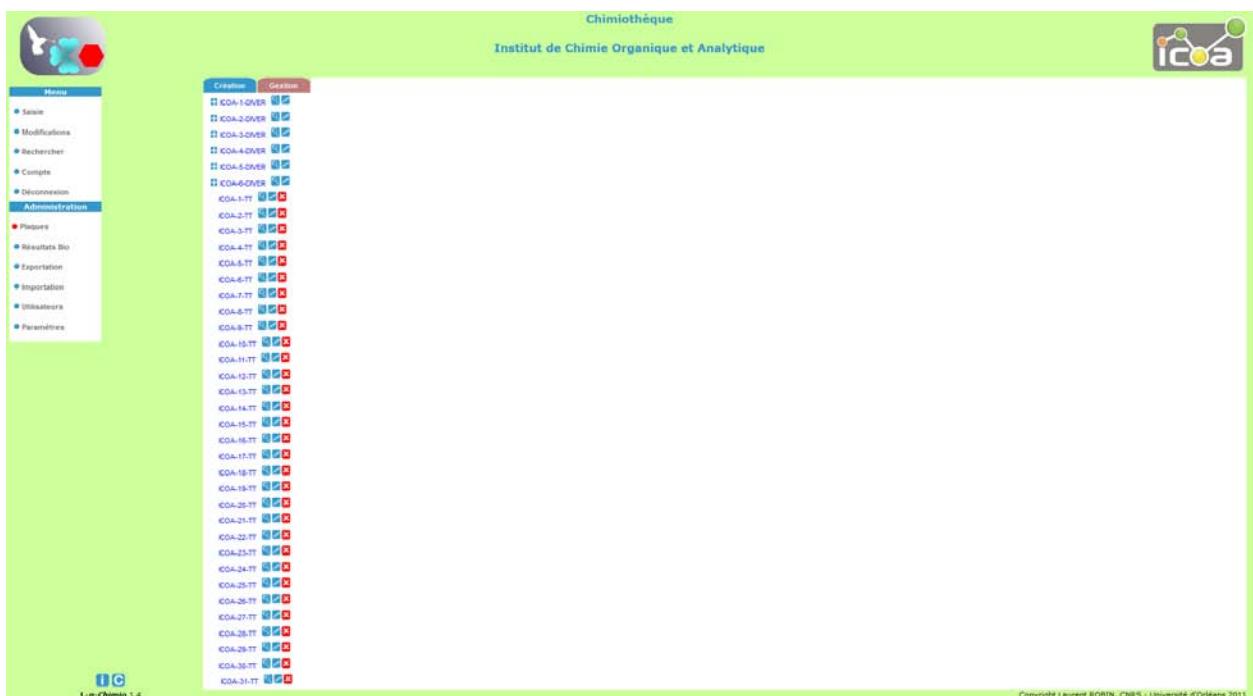


Image 71 : Gestion des plaques 96 puits créées

Cette interface vous permet d'avoir une vue d'ensemble de vos plaques créées et de visualiser (Image 72) l'ensemble de l'architecture qui lie les plaques : mères – filles – petites filles.

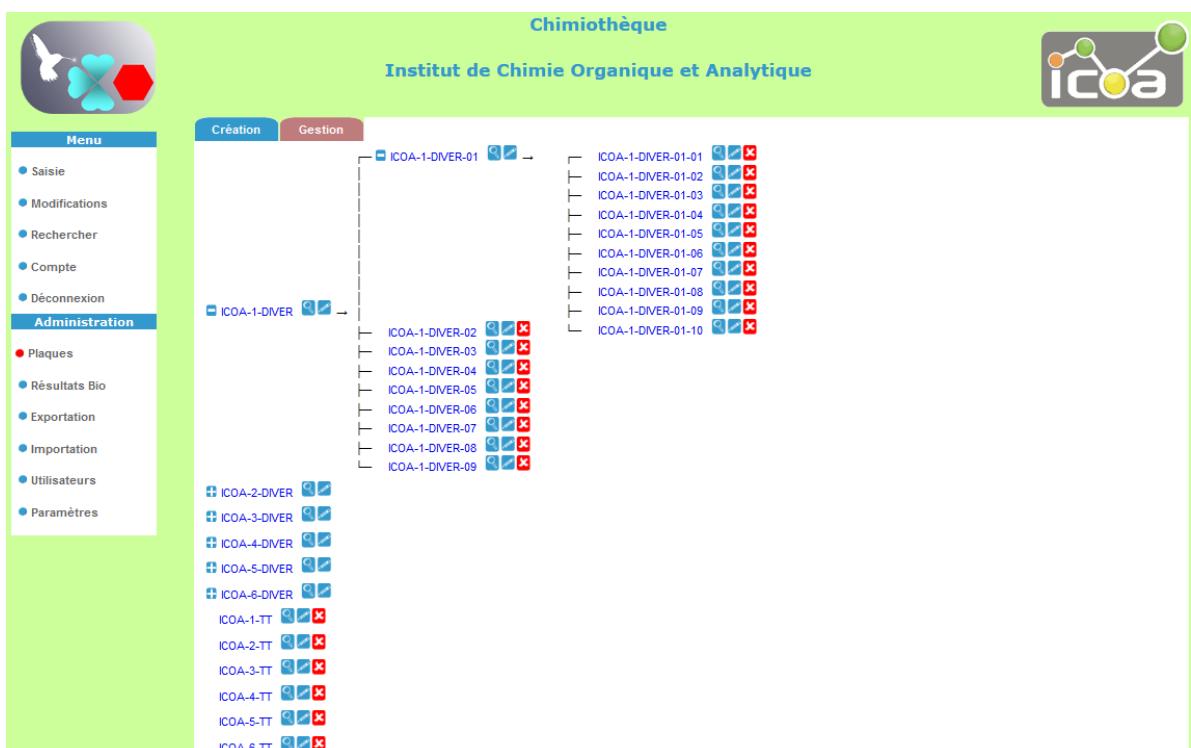


Image 72 : vue des liens plaque mère - filles - petites filles

En passant la souris sur le numéro d'une plaque, vous pouvez voir les informations qui la concernent : solvant utilisé, le volume des puits de la plaque, masse du produit par puits, date de création. Pour les plaques filles, le volume prélevé dans la plaque mère.

1. SUIVI DES TESTS BIOLOGIQUES

Pour chaque plaque vous pouvez insérer les informations d'envoi en test biologique en cliquant sur le numéro de la plaque. Cela vous aide à avoir le suivi individualisé pour chacune d'elle. Une fois que vous avez cliqué sur le numéro de la plaque, vous arrivez sur un formulaire vous permettant, soit de sélectionner une référence de test biologique déjà répertorié, soit d'en créer une ([Image 73](#)).

Si vous créez une nouvelle référence de test biologique, vous pourrez renseigner les éléments suivants : le nom de la cible, la concentration du test, la concentration en mol/L du test et le laboratoire effectuant le test.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

Création **Gestion**

Numéro de la plaque à usage interne : ICOA-4-TT

Test biologique :

Date d'envoi :
09 / 11 / 2017

Cibles répertoriées :
-- Sélectionnez une cible --

Nouvelle cible :

Concentration : mol. L⁻¹

Protocole du test :

Laboratoire :

Sauvegarde

Sélection d'une référence de test biologique

Création d'une référence de test biologique

Copyright Laurent COUBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

[Image 73 : Formulaire de sélection ou de création d'un test biologique](#)

Une fois que vous avez créé ou sélectionné votre référence de test biologique et validé le formulaire, la plaque est associée au test ([Image 74](#)).

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique



Menu

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

Création **Gestion**

Numéro de la plaque à usage interne : ICOA-1-TT

Nom de la cible :
AChE electrophorus electricus

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 Pamlard (ICSN) et Sophie Corvaisier (CERMN).

Concentration :
0.001 mol. 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.

Date d'envoi : 09 11 2017

Cibles répertoriées : -- Sélectionnez une cible --

Nouvelle cible :

Concentration : mol. L⁻¹

Protocole du test :

Laboratoire :

Sauvegarde

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 74 : Test biologique associé à la plaque

Pour chaque plaque, vous pouvez suivre le test associé avec la date d'envoi de la plaque et tous les détails du test biologique. Vous pouvez entrer plusieurs tests pour une plaque.

À partir de la vue générale des plaques (Image 72), vous pouvez, en cliquant sur l'icône de la loupe, côté droit du numéro de la plaque, voir l'ensemble des produits qui la compose (Image 75).

Rappel : la plaque de 96 puits est composée de 80 produits, car les deux colonnes extérieures (colonne 1 et 12) doivent rester libres pour effectuer les tests de référence.

2. VISUALISATION DU CONTENU DE LA PLAQUE

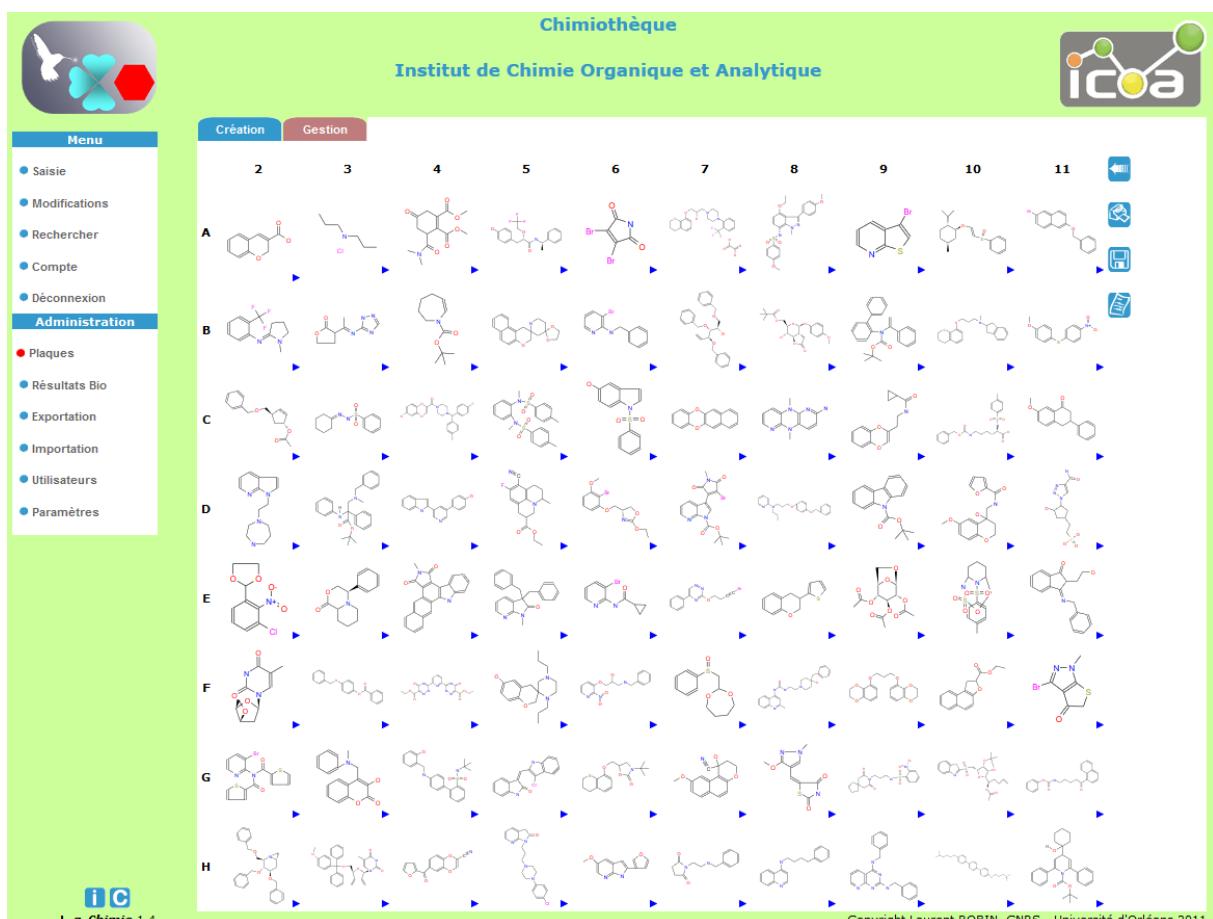


Image 75 : vue de la composition de la plaque 96 puits

Vous pouvez :

- soit imprimer la plaque en cliquant sur l'icône
- soit télécharger au format SDF les informations de la plaque en cliquant sur l'icône

Un fichier SDF (Image 76), est un type de fichier ayant une organisation bien définie et structurée.

C'est un fichier texte contenant dans notre cas les informations suivantes : les molécules au format mol, le numéro de la molécule, le numéro de position sur la plaque, la masse du produit en mg, la masse molaire exacte de la molécule et la concentration du produit dans le puits.

Chaque entrée est séparée par une ligne : \$ \$\$, qui permet de délimiter un groupe d'informations correspondant à une molécule.

```

$$$$
Marvin 01180619152D

11 11 0 0 0          999 V2000
 3.2037  0.2750  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 2.4893 -0.1375  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 2.4893 -0.9625  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 3.2037 -1.3750  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 3.9182 -0.9625  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 3.9182 -0.1375  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1.7748  0.2750  0.0000 O  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 1.0603 -0.1375  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 4.6327 -1.3750  0.0000 S  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 5.3472 -0.9625  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 4.6327 -2.2000  0.0000 O  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
1  2  1  0  0  0  0
1  6  2  0  0  0  0
2  3  2  0  0  0  0
3  4  1  0  0  0  0
4  5  2  0  0  0  0
5  6  1  0  0  0  0
2  7  1  0  0  0  0
7  8  1  0  0  0  0
5  9  1  0  0  0  0
9 10  1  0  0  0  0
9 11  2  0  0  0  0
M END
> <identifier>
96225478

> <position>
A10

> <mass_mg>
3

> <exact_molecular_weight_g/mol>
170.040150254

> <average_concentration_mol/L>
0.01

$$$$

```

Molécule au format « mol »

Code local d'identification de la substance

Cordonnée sur la plaque

Masse du produit présent dans le puits en mg

Masse molaire exacte

Concentration dans le puits

Balise de fin pour une référence

Image 76 : extrait d'un fichier SDF

- soit télécharger au format CSV les informations en cliquant sur l'icône .

Le format CSV est un format texte pouvant être simplement utilisé par l'application Excel ou d'autres tableurs, ou bases de données.

Le fichier texte se présente sous la forme suivante :

```

number;position;mass mg;molecular weight g/mol;[] mol/L

89603078;A2;3;204.035733578;0.01

63952987;A3;3;198.100442324;0.01

22659896;A4;3;285.084060302;0.01

58792950;A5;3;177.078978601;0.01

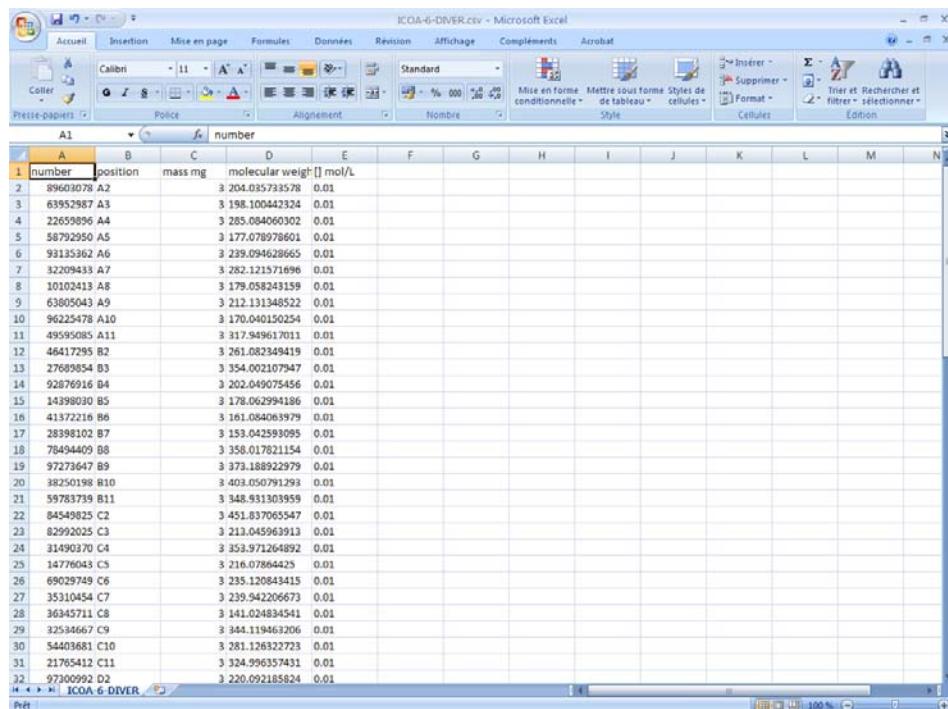
93135362;A6;3;239.094628665;0.01

32209433;A7;3;282.121571696;0.01

```

10102413;A8;3;179.058243159;0.01
 63805043;A9;3;212.131348522;0.01
 96225478;A10;3;170.040150254;0.01
 49595085;A11;3;317.949617011;0.01
 46417295;B2;3;261.082349419;0.01

Ce même fichier vu sous l'application Excel :



| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M |
|----|----------|----------|---------|---------------------------|------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Number | position | mass mg | molecular weight [] mol/L | | | | | | | | | |
| 2 | 89603078 | A2 | | 3 204.035733578 | 0.01 | | | | | | | | |
| 3 | 63952887 | A3 | | 3 198.100442324 | 0.01 | | | | | | | | |
| 4 | 22659896 | A4 | | 3 285.084060302 | 0.01 | | | | | | | | |
| 5 | 58792950 | A5 | | 3 177.078978601 | 0.01 | | | | | | | | |
| 6 | 93135362 | A6 | | 3 239.094628665 | 0.01 | | | | | | | | |
| 7 | 32209433 | A7 | | 3 282.121571696 | 0.01 | | | | | | | | |
| 8 | 10102413 | A8 | | 3 179.058243159 | 0.01 | | | | | | | | |
| 9 | 63805043 | A9 | | 3 212.131348522 | 0.01 | | | | | | | | |
| 10 | 96225478 | A10 | | 3 170.040150254 | 0.01 | | | | | | | | |
| 11 | 49595085 | A11 | | 3 317.949617011 | 0.01 | | | | | | | | |
| 12 | 46417295 | B2 | | 3 261.082349419 | 0.01 | | | | | | | | |
| 13 | 27693954 | B3 | | 3 354.002107947 | 0.01 | | | | | | | | |
| 14 | 92876916 | B4 | | 3 202.049075456 | 0.01 | | | | | | | | |
| 15 | 14398030 | B5 | | 3 178.062994186 | 0.01 | | | | | | | | |
| 16 | 41372216 | B6 | | 3 161.084083979 | 0.01 | | | | | | | | |
| 17 | 28398102 | B7 | | 3 153.042593095 | 0.01 | | | | | | | | |
| 18 | 78494409 | B8 | | 3 358.017821154 | 0.01 | | | | | | | | |
| 19 | 97273647 | B9 | | 3 373.188922979 | 0.01 | | | | | | | | |
| 20 | 38250198 | B10 | | 3 403.050791293 | 0.01 | | | | | | | | |
| 21 | 59783739 | B11 | | 3 348.931303959 | 0.01 | | | | | | | | |
| 22 | 84549025 | C2 | | 3 451.837065547 | 0.01 | | | | | | | | |
| 23 | 82992025 | C3 | | 3 213.045963913 | 0.01 | | | | | | | | |
| 24 | 31490370 | C4 | | 3 353.971264892 | 0.01 | | | | | | | | |
| 25 | 14776043 | C5 | | 3 216.07864425 | 0.01 | | | | | | | | |
| 26 | 69029749 | C6 | | 3 235.120843415 | 0.01 | | | | | | | | |
| 27 | 35310454 | C7 | | 3 239.942206673 | 0.01 | | | | | | | | |
| 28 | 36345711 | C8 | | 3 141.024834541 | 0.01 | | | | | | | | |
| 29 | 32534667 | C9 | | 3 344.119463206 | 0.01 | | | | | | | | |
| 30 | 54403681 | C10 | | 3 281.126322723 | 0.01 | | | | | | | | |
| 31 | 21765412 | C11 | | 3 324.996357431 | 0.01 | | | | | | | | |
| 32 | 97300992 | D2 | | 3 220.092185824 | 0.01 | | | | | | | | |

3. MODIFICATION D'UNE PLAQUE

À partir de la page de gestion des plaques, cliquez sur l'icône en face de la plaque que vous désirez modifier. Vous arrivez alors sur la page de modification de votre plaque 96 puits.

Image 77 : vue principale de la page de modification d'une plaque

Pour modifier un puits cliquez sur celui-ci sur la représentation de la plaque (Image 80). Sur la partie droite un ensemble de menus apparaît qui vous permet soit de modifier la structure associée au puits soit de supprimer et libérer le puits (Image 81).

Image 78: modification d'un puit de la plaque

Le puits libre apparaîtra en rouge (Image 79). Il pourra être laissé tel quel ou une autre substance pourra être mise à la place.

The screenshot shows the 'Chimiothèque' software interface. On the left, there's a sidebar with a logo and a navigation menu under 'Administration' which includes 'Plaques', 'Résultats Bio', 'Exportation', 'Importation', 'Utilisateurs', and 'Paramètres'. The main area has tabs 'Création' and 'Gestion'. A note says: 'Toutes les modifications des puits sur cette page n'affecteront pas de modifications de la masse du stockage du produit en vrac. C'est à vous de modifier la fiche du produit correspondant.' Below this are fields for 'Numéro de la plaque à usage interne' (test3), 'Numéro de la plaque à usage externe', 'Concentration moyenne' (0.1 mol. L⁻¹), 'Volume de la plaque' (3 mL), and 'Masse de produit par puits' (2 mg). To the right is a 12x12 grid of wells labeled A through H on the top and 1 through 12 on the left. Well A8 is highlighted with a red circle. Below the grid are two rows of chemical structures labeled A and B, each with 11 numbered boxes from 2 to 11.

Image 79 : puit vide

4. SUPPRESSION D'UNE PLAQUE

À partir de la vue principale de la gestion des plaques ([Image 72](#)) vous pouvez supprimer une plaque en appuyant sur l'icône à côté de la plaque. Cette action n'est possible que si la plaque en question n'a pas de plaques filles affiliées à elle.

C. RESULTATS DES TESTS BIOLOGIQUES

Cette section permet au chimiothécaire de gérer l'ensemble des résultats biologiques concernant ses molécules ou plaques.

1. IMPORTATION DES RESULTATS

En allant sur la section « Résultats bio » et sur « importer », vous avez la possibilité d'insérer des résultats suite à un test biologique. Il vous faut tout d'abord créer une cible biologique ou la sélectionner si elle existe déjà ([Image 80](#)).

Pour créer une nouvelle cible, vous devez utiliser la partie droite du formulaire en renseignant les champs suivants :

nom de la cible, le code UniProt (référence de la protéine <http://fr.wikipedia.org/wiki/UniProt>), Concentration du test en mol. L⁻¹, le protocole de test et le laboratoire. Puis cliquez sur sauvegarder.

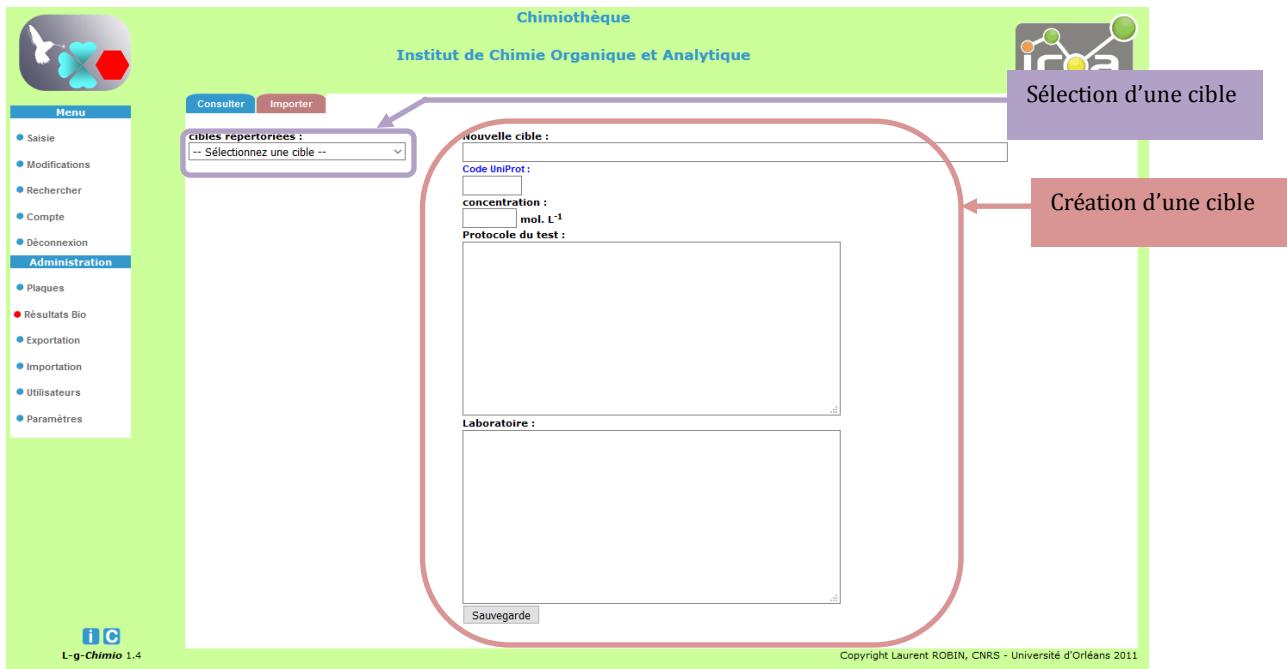


Image 80 : première page d'importation des résultats avec la sélection ou la création d'une cible biologique

Pour sélectionner une cible déjà renseignée, vous devez avoir recours à la partie gauche du formulaire et utiliser le menu déroulant. Une fois choisie, vous avez la possibilité de créer un nouveau protocole de test ou d'en sélectionner un déjà existant pour cette cible (Image 81).

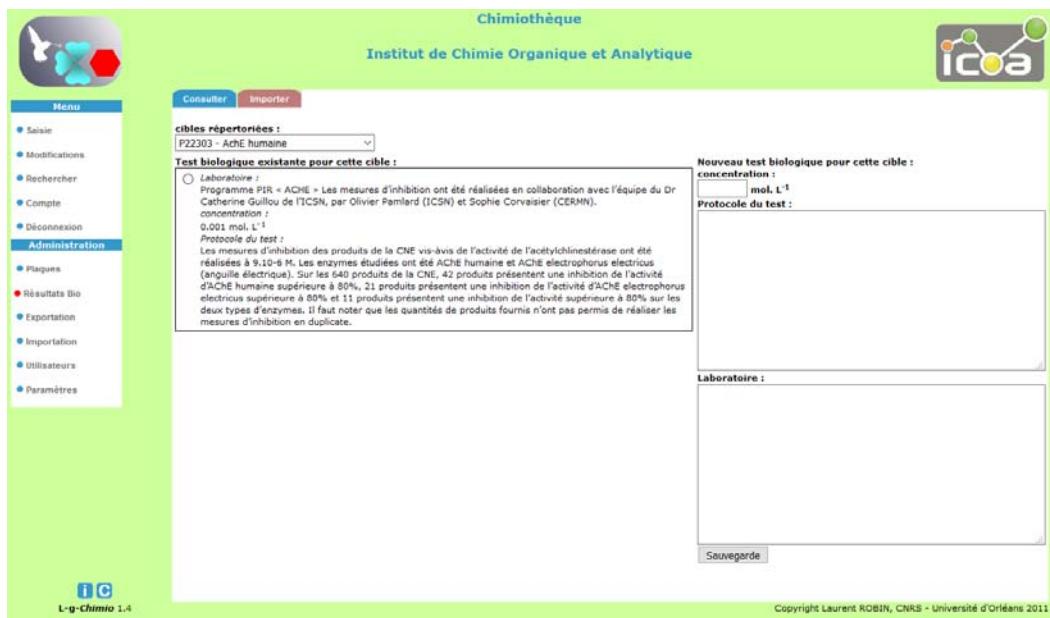


Image 81 : création d'un nouveau protocole de test ou sélection d'un protocole déjà existant

Une fois que vous avez sélectionné ou créé le test biologique, vous arrivez sur une page (Image 82) en 3 parties :

La première partie résume les informations sur la cible, vous pouvez tout à fait changer de cible par l'intermédiaire du menu déroulant ou alors changer de protocole.

Informations sur la cible

Résultat de référence :

Importation

Fichier de résultats au format CSV

Image 82 : 2ème page d'insertion des résultats biologiques

Dans la deuxième partie du formulaire, vous pouvez apporter des renseignements supplémentaires, facultatifs par rapport au test. Vous pouvez renseigner la date de réception des résultats, le nom basique et/ou en nomenclature IUPAC, les résultats de la molécule de référence et l'unité des résultats.

Dans la troisième partie, vous pouvez charger le fichier de résultats sous la forme d'un fichier texte de type CSV (**au format Windows**). Il faut qu'il contienne le numéro local de la molécule et les résultats correspondants.

Rappel le fichier CSV est un fichier texte où chaque ligne représente une entrée. Chaque segment contient plusieurs informations séparées par un « ; » par exemple ici le numéro de référence et le résultat biologique :

10102413;44.9

58216832;30.1

39246724;55.8

Lorsque vous avez renseigné et soumis le formulaire, vous arrivez sur une page vous permettant de trier les informations du fichier CSV. Chaque champ d'une ligne du fichier CSV est représenté avec un extrait des données. Vous devez par l'intermédiaire d'un menu déroulant sélectionner le type d'information présentée ([Image 83](#)). Vous devez avoir au minimum le numéro de référence de la molécule et un résultat biologique.

Après avoir sélectionné chaque type d'information, cliquez sur « Soumettre ». Ainsi l'ensemble des résultats biologiques sera importé et associé au test et aux molécules.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique
icoa

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Administration

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

Consulter Importer

Type d'information :
-- Sélectionnez un type --

Type d'information :
-- Sélectionnez un type --

67857278
94716920
83936771
30621925
68602077
23861805
13960998
58188121
62732104

44,9
18,2
33,7
4,5
12,8
16,8
12,5
4,9
0,0
0,0

Soumettre

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

Image 83 : Page d'importation des données CSV

2. CONSULTATION DES RESULTATS

En allant sur la section « Résultats bio » et sur « consulter », vous avez la possibilité de consulter l'ensemble des résultats biologiques entrés (Image 84).

chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique
icoa

Menu

- Saisie
- Modifications
- Rechercher
- Compte
- Déconnexion

Administration

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

Consulter Importer

cibles répertoriées :
-- Sélectionnez une cible --

L-g-Chimio V1.2 Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 84 : Page de consultation des résultats biologiques

Pour ce faire, vous devez sélectionner, dans la première partie du formulaire, par l'intermédiaire du menu déroulant, la cible souhaitée. Sélectionnez le test biologique et le type de résultats biologiques que vous souhaitez consulter.

La deuxième partie du formulaire met en relation les structures chimiques avec les résultats biologiques ([Image 85](#)).

| Structures | IC ₅₀ ▼▲ | EC ₅₀ ▼▲ | Actif/Inactif ▼▲ | % activité | % inhibition | Autre résultat | Commentaires | |
|----------------------------------|---------------------|---------------------|------------------|------------|--------------|----------------|---|--|
| ICOA-SBR-L-05A04 57857278 | | | Actif | 18.2 | 44.9 | | <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> | |
| ICOA-SBR-L-09H09 64843424 | | | | | 18.2 | | <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> | |
| ICOA-FST-L-02A06 94716920 | | | | | 33.7 | | <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> | |

[Image 85 : Consultation des résultats biologiques pour une cible](#)

Grâce au menu « Type d'information » vous pouvez sélectionner l'affichage que d'un type de résultat : IC₅₀, actif/inactif, %activité, %inhibition, EC₅₀, autre résultat ou de l'ensemble des informations.

Vous pouvez effectuer un classement des informations par ordre croissant ▼ ou décroissant ▲ en cliquant sur l'icône correspondant.

La zone de commentaires permet d'annoter avec des informations spécifiques, les résultats pour une structure. Pour écrire cette annotation ou pour insérer un autre résultat ou effectuer une modification pour une molécule, vous pouvez cliquer sur l'icône . La page est modifiée pour laisser place à un formulaire, vous permettant d'insérer ou modifier les informations ([Image 86](#)).

Pour valider votre modification des données biologiques pour cette structure et ce test biologique, cliquez sur le bouton « Modifier » en bout de ligne.

Image 86 : Formulaire d'insertion ou de modification des données biologiques existantes

Si vous souhaitez télécharger l'ensemble des résultats biologiques sous forme de fichier SDF, cliquez sur le bouton en haut à droite des résultats.

Le fichier SDF contiendra la structure moléculaire, le numéro de référence de la structure et le type de résultat sélectionné par l'intermédiaire du menu déroulant « Type d'information ».

D. IMPORTATION DE DONNEES DANS L-G-CHIMIO

Grâce à la section « Importation », vous pouvez intégrer des données comme la numérotation de la Chimiothèque Nationale, la tare de vos piluliers pour les produits en vrac, ou la liste des molécules envoyées chez Evotec.

1. IMPORTATION DE LA NUMEROTATION DE LA CHIMIOTHEQUE NATIONALE

À partir d'un fichier de type CSV au format Windows (chapitre III.B), vous pouvez charger les numéros attribués par la Chimiothèque Nationale dans vos fiches de produit. Cela associe le numéro national (ex : CN053402V) à votre numérotation locale (*soit la numérotation pilulier, soit la numérotation permanente à 8 chiffres*). Lorsque vous envoyez vos données sous forme de SDF à la Chimiothèque Nationale (chapitre Erreur ! Source du renvoi introuvable.) et une fois votre mise à jour intégrée au serveur Nationale, vous recevez un fichier texte contenant le

numéro national et votre numéro local. À partir de celui-ci, vous créez un fichier CSV en ajoutant un « ; » entre les numéros et en supprimant la ligne « ID LOCAL ID NATIONAL ».



Image 87 : formulaire de chargement des données nationale

Pour charger le fichier, cliquez sur « parcourir » dans l'explorateur de fichier, cherchez votre fichier CSV et cliquez sur « ouvrir ». L'explorateur se ferme et le chemin du fichier apparaît dans le champ. Cliquez sur le bouton « soumettre ». Si des numéros n'ont pas été entrés par le système, une erreur vous est signalée ([Image 88](#)). Les anciennes données de numéros nationaux sont écrasées par une nouvelle entrée via un fichier CSV.



Image 88: Retour d'erreur de numéros de la CN non insérés

2. IMPORTATION DE LA TARE DES PILULIERS

À partir d'un fichier CSV, vous pouvez charger les tares pour vos piluliers de stockage des produits en vrac ([Image 89](#)). Le fichier CSV doit contenir le numéro local (*soit la numérotation pilulier, soit la numérotation permanente à 8 chiffres*) et la tare en mg du pilulier vide et sans bouchon. La masse du pilulier peut être notée soit avec un point, soit avec une virgule, mais doit être exprimée en mg et l'unité ne doit pas être notée.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. At the top, there's a header with the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". On the left, there's a sidebar with a logo featuring a stylized bird and three shapes (blue hexagon, red hexagon, green hexagon). The sidebar has a "Menu" section with links like "Saisie", "Modifications", "Rechercher", "Compte", "Déconnexion", and an "Administration" section which is currently selected. Under "Administration", there are links for "Plaques", "Résultats Bio", "Exportation", "Importation" (which is highlighted in red), "Utilisateurs", and "Paramètres". At the bottom of the sidebar, it says "L-g-Chimio 1.4". The main content area has a title "Importation de la tare des piluliers contenant les produits en vrac". Below the title, there's a form field labeled "Fichier de type CSV :" with a "Parcourir..." button, a message "Aucun fichier sélectionné.", and a "Soumettre" button. There's also a small question mark icon. At the bottom right of the main area, it says "Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011".

[Image 89 : formulaire d'insertion d'un fichier CSV avec la tare des piluliers](#)

Pour charger le fichier, cliquez sur « parcourir » dans l'explorateur de fichier, cherchez votre fichier CSV et cliquez sur « ouvrir ». L'explorateur se ferme et le chemin du fichier apparaît dans le champ.

Cliquez sur le bouton « soumettre ». Si des masses n'ont pas été entrées par le système, elles vous sont signalées en rouge ([Image 90](#)). Cela peut vouloir dire tout simplement que le pilulier n'est pas encore utilisé. Les tares ne sont entrées que pour les numéros déjà existants dans la base de données.

Les nouvelles données entrées via un CSV écrasent les anciennes tares.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. On the left, there is a sidebar with a logo at the top, followed by a 'Menu' section with various options like Saisie, Modifications, Rechercher, Compte, Déconnexion, Administration, Plaques, Résultats Bio, Exportation, Importation, Utilisateurs, and Paramètres. Below this is a 'Administration' section with Importation highlighted. The main area is titled 'Chimiothèque' and 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. It displays a list of mass entries (tare) for products that have not been entered into the database. The text is in French and lists numerous entries such as 'La tare : 4920.5 pour le produit : ICOA-SRR-C-33C03 n'a pas été entré dans la base de données.' and 'La tare : 4908.6 pour le produit : ICOA-SRR-C-33C04 n'a pas été entré dans la base de données.'.

Image 90 : Retour de masse non entrée

3. IMPORTATION DE LA LISTE DES MOLECULES ENVOYEEES CHEZ EVOTEC

Dans la section Tag Evotec ([Image 91](#)), vous pouvez à partir d'un fichier CSV charger la liste des molécules que vous avez envoyées chez la Société Evotec. Cela permet de taguer les substances que vous avez déjà envoyées. Ce tague sera utilisé dans la section exportation (Chapitre **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**) pour donner l'information à la CN via le fichier SDF, soit pour vous, afin de faire le tri entre les molécules déjà envoyées ou non.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. On the left, there is a sidebar with a logo at the top, followed by a 'Menu' section with various options like Saisie, Modifications, Rechercher, Compte, Déconnexion, Administration, Plaques, Résultats Bio, Exportation, Importation, Utilisateurs, and Paramètres. Below this is a 'Administration' section with Importation highlighted. The main area is titled 'Chimiothèque' and 'Institut de Chimie Organique et Analytique'. It displays a form for importing permanent substance numbers from a CSV file. The form includes fields for 'CSV file:' (with a 'Parcourir...' button), 'Defal the stock with the mass for each molecule' (with a checkbox), and a 'Soumettre' button. At the bottom right, there is a copyright notice: 'Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011'.

Image 91 : Page principale du référencement des molécules envoyées chez Evotec

Ce fichier texte de type CSV doit avoir le numéro permanent de la substance envoyée et la masse en mg de produit (sans l'unité).

Si les références que vous essayez de rentrer n'existent pas alors, la liste de celles-ci est notée en rouge ([Image 92](#)).

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. At the top, there is a logo with a stylized bird and a flower, followed by the text "Chimiothèque" and "Institut de Chimie Organique et Analytique". In the top right corner, there is a logo for "icoa". Below the header, there is a navigation bar with tabs: "Numéros CN", "Tare piluliers", "Tag Evotec", and "Importation des numéros permanents (8 chiffres) des substances envoyées chez EVOTEC". On the left side, there is a sidebar with a "Menu" section containing links for "Saisie", "Modifications", "Rechercher", "Compte", and "Déconnexion". Below that is an "Administration" section with links for "Plaques", "Résultats Bio", "Exportation", "Importation" (which is highlighted in red), "Utilisateurs", and "Paramètres". The main content area displays a large list of red text entries, each starting with "La référence :". These entries list various chemical structures and their corresponding mass values, such as "22854005 avec une masse de : 1,5 mg n'a pas été entrée dans la base de données car la référence n'existe pas" and "La référence : 49463840 avec une masse de : 1,5 mg n'a pas été entrée dans la base de données car la référence n'existe pas". There are approximately 50 such entries.

[Image 92 : Liste des références non connues dans la base de données](#)

E. IMPORTATION DE FICHIER SDF ET RDF

Dans cette section vous avez la possibilité d'importer dans L-g Chimio des données à partir de fichiers SDF ou RDF.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. At the top, there is a logo with a stylized bird and a flower, followed by the text "Chimiothèque" and "UGCN". In the top right corner, there is a logo for "CNRS". Below the header, there is a navigation bar with tabs: "Numéros CN", "Tare piluliers", "Tag Evotec", and "Importation des numéros permanents (8 chiffres) des substances envoyées chez EVOTEC". On the left side, there is a sidebar with a "Menu" section containing links for "Saisie", "Modifications", "Rechercher", "Compte", and "Déconnexion". Below that is an "Administration" section with links for "Plaques", "Résultats Bio", "Exportation", "Importation" (which is highlighted in red), "Utilisateurs", "Attribution échantillon", and "Paramètres". The main content area has a title "Importation de fichier SDF et RDF". It contains a form with fields for "Fichier de type SDF ou RDF :" (with a "Choisir un fichier" button) and "Correction des structures :" (with options "Pendant l'importation" and "Après l'importation", and a "Envoyer" button). At the bottom of the page, there is a footer with the text "IWC" and "Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2018".

[Image 93 : Page principale du module d'importation de fichier SDF/RDF](#)

Pour ce faire il vous suffit de sélectionner le fichier souhaité et de poursuivre les étapes jusqu'à être sur l'écran ci-dessous :

Image 94 : Page de correspondances entre le fichier et la base de données

Vous aurez besoin de faire correspondre les champs présents dans votre fichier avec ceux qui sont présent dans L-g Chimio.

Pour chaque champ du fichier il est affiché son nom ainsi que des extraits des valeurs, vous n'aurez qu'à sélectionner dans la liste qui se trouve en dessous, le champ qui correspond à cette information.

Une fois le fichier traité entièrement, vous pouvez envoyer ces informations.

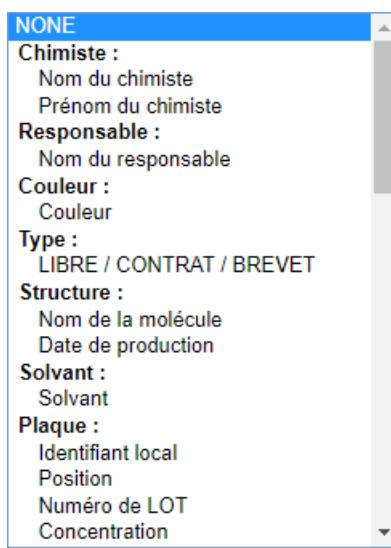


Image 95 : Choix des correspondances

Les données seront envoyées vers la base et intégrées à L-g Chimio. Si le fichier comporte des erreurs, une liste des numéros d'identifiant de molécule sera affichée à l'écran, et un fichier de log au format CSV sera automatiquement téléchargé.



Image 96 : Page de fin d'importation du module d'importation de fichier SDF/RDF

F. EXPORTATION SELECTIVE & MULTICRITERE

Commencez par sélectionner le format du fichier souhaité (SDF ou CSV). Puis vous aurez le choix de sélectionner les champs que vous voulez voir apparaître dans le fichier, si rien n'est coché, les champs exportés par défaut seront ceux nécessaires à lachimiothèque nationale (la structure moléculaire, identifiant local, masse du produit en vrac et/ou numéro de la plaque contenant la structure, numéro du lot de plaque, origine de la structure, pureté, mesure de la pureté).

Définissez vos critères en cochant vos choix.



Image 97 : Page principale du module d'exportation sélective et multicritère

Par mesure de sécurité, votre mot de passe est nécessaire pour effectuer l'exportation.

À ce stade vous avez la possibilité de télécharger le fichier ou d'afficher la liste des identifiés correspondant au critère.

G. EXPORTATION AU FORMAT CSV POUR LA PESEE EVOTEC

Cette section vous sera utile pour créer un fichier au format CSV utilisable sous Excel pour effectuer la pesée de vos substances à envoyer chez Evotec.

Chimiothèque
Institut de Chimie Organique et Analytique

1ère partie

2ème partie

Pesées à partir d'une ou des boîte(s) de chimiothèque complète :

- ICOA-ATT-L-1
- ICOA-ATT-L-2
- ICOA-ATT-L-3
- ICOA-ATT-L-4
- ICOA-ATT-L-5
- ICOA-FST-C-1
- ICOA-FST-C-2
- ICOA-FST-C-3
- ICOA-FST-C-4
- ICOA-FST-L-1
- ICOA-FST-L-10
- ICOA-FST-L-11
- ICOA-FST-L-12
- ICOA-FST-L-13
- ICOA-FST-L-14

Ajouter les produits identiques comme alternative de pesée
 Enlever les produits déjà envoyés chez EVOTEC et les doublons de structure
 Mélanger les produits aléatoirement

Télécharger le Fichier CSV

Pesées à partir d'une liste de numéros de produits :

Séparateur utilisé pour la liste : ;

Télécharger le Fichier CSV

Copyright Laurent ROBIN, CNRS - Université d'Orléans 2011

Image 98 : formulaire d'exportation des données au format CSV

Ce formulaire est en deux parties :

- La première partie permet d'exporter une ou plusieurs boîtes directement au format CSV
- La deuxième partie l'exportation est effectuée à partir d'une liste de numéros de substances.

1. EXPORTATION A PARTIR D'UNE OU PLUSIEURS BOITES

Vous devez sélectionner une ou plusieurs boîtes dans la liste de gauche. Ensuite, vous avez plusieurs options que vous pouvez cocher pour l'exportation :

- Ajouter les produits identiques comme alternative de pesée : cette option permet d'avoir pour une structure unique les différentes substances existantes dans votre chimiothèque. Cela permet, d'utiliser la substance qui est en quantité suffisante.

| code barre d'identificateur local du composé | numéro unique | Poids (mg) | MW (g/mol) |
|--|---------------------|------------|------------|
| ICOA-ATT-L-01A02 / ICOA-ATT-L-03A06 | 20834614 / 69034697 | 458.567 | |
| ICOA-ATT-L-01A03 | 23567797 | 320.446 | |
| ICOA-ATT-L-01A04 | 54704848 | 325.403 | |
| ICOA-ATT-L-01A05 | 12207746 | 476.566 | |
| ICOA-ATT-L-01A06 | 83008347 | 359.395 | |
| ICOA-ATT-L-01A07 / ICOA-ATT-L-02B04 | 12787625 / 62295675 | 253.459 | |

Image 99 : extrait d'un fichier CSV avec alternative de substances

- Enlever les produits déjà envoyés chez EVOTEC et les doublons de structure : grâce aux données entrées dans la section « importation – Tag Evotec » (Chapitre III.D.3) en cochant cette option cela élimine de l'exportation les structures déjà pesées et envoyées chez la société Evotec.
- Mélanger les produits aléatoirement : cette option permet de faire un export, mais avec les produits dans un ordre aléatoire.

2. EXPORTATION A PARTIR D'UNE LISTE DE PRODUITS

La deuxième partie du formulaire permet d'effectuer un export au format CSV à partir d'une liste de substance en utilisant soit le numéro unique à 8 chiffres soit le numéro local. Ensuite vous définissez le séparateur entre vos valeurs grâce au menu déroulant. Ensuite, vous cliquez sur « Télécharger le fichier CSV ». Exemple : [Image 100](#).

Pesées à partir d'une liste de numéros de produits :



Séparateur utilisé pour la liste :

Télécharger le Fichier CSV

[Image 100](#) : exemple d'utilisation de la 2^{ème} partie du formulaire

H. REATTRIBUTIONS DES MOLECULES

Pour réattribuer une molécule à un chimiste, deux choix s'offrent à vous.

- Soit par la page « Attribution structures ».
- Soit par le bouton « Réattribuer la structure à un chimiste » qui se trouve en haut à droite de la page de « Modifications ».

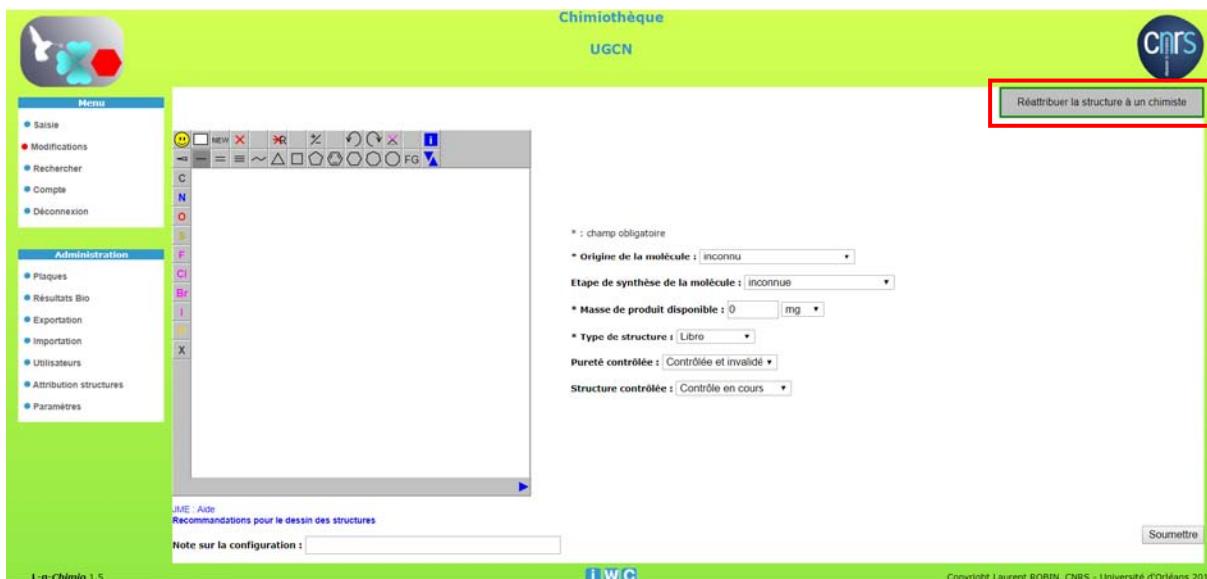


Image 101 : Position du bouton de réattribution de structure sur modification

La procédure est simple, vous avez juste à rentrer l'identifiant local du produit, puis à sélectionner les nouvelles informations concernant le chimiste (l'équipe, le responsable et le chimiste). Cliquer sur le bouton pour enregistrer les modifications.



Image 102 : Page principale du module de réattribution

I. CONTROLE DE LA PURETE ET DE LA STRUCTURE

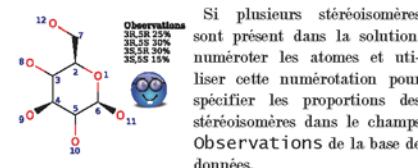
Pour définir le statut de vos contrôles, il vous est possible de choisir l'une des quatre étapes disponibles dans le formulaire de modification du produit.

The screenshot shows the L-g-Chimio software interface. On the left, there's a vertical sidebar with 'Menu' and 'Administration' sections. The main area is titled 'Chimiothèque UGCN'. It includes a toolbar with various chemical drawing tools. A dropdown menu labeled 'Structure contrôlée' is open, showing five options: 'Non contrôlée' (selected), 'Non contrôlée', 'Contrôle en cours', 'Contrôlée et validé', and 'Contrôlée et invalidé'. The entire dropdown menu is enclosed in a red box.

Image 103 : Statut du contrôle de la pureté et de la structure

IV. ANNEXES

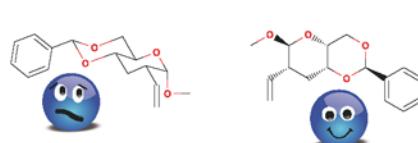
A. RECOMMANDATIONS POUR LA NORMALISATION DE STRUCTURES DE LA CIN



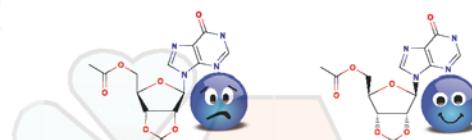
Si la structure porte un label **Cl** STEREO-OR.ENANTIOMER, cela signifie que la substance contient le composé dessiné sur son énantiomère.

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 chassés gonane, estane, androstane, pregnane et leurs dérivés.



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



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

Organo-métalliques



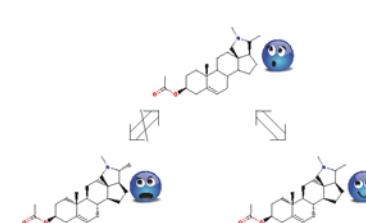
Préférer des représentations utilisant des liaisons covalentes dans le respect des règles de Lewis. Seules les liaisons conventionnelles (simple, double, triple et aromatique) sont supportées par tous les formats électroniques utilisés dans les bases de données.



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 Chimiothéque Nationale afin de diminuer le nombre d'ambiguités qui nuisent au traitement automatique des données et à l'interprétation des résultats de criblage.



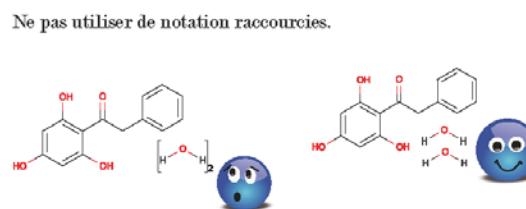
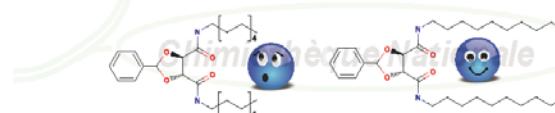
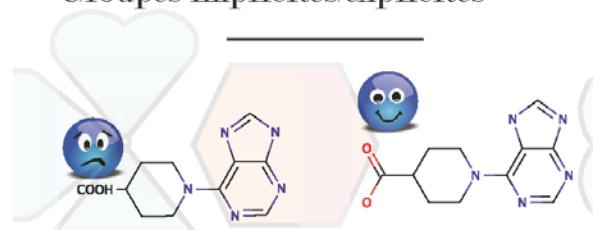
22 Février 2012

Format et identifiant

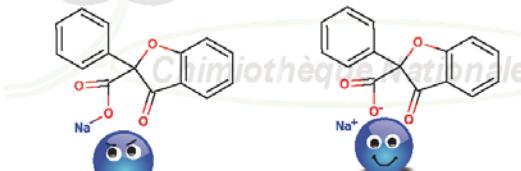
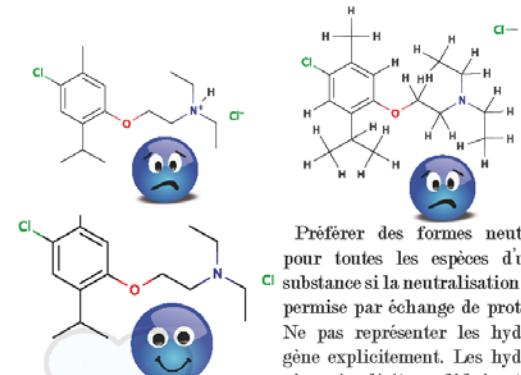
Vérifier avant de transmettre des structures que les identifiant sont conformes à la Chimiothérapie Nationale.

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.

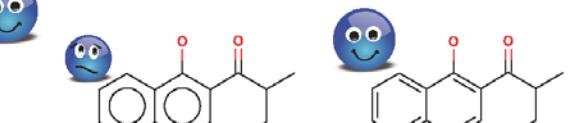
Groupes implicites/explícites



Hydrogènes et charges formelles

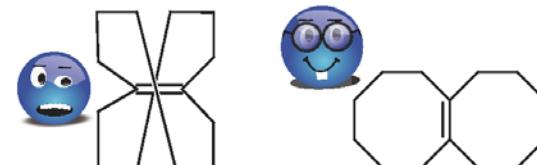


Aromatisations

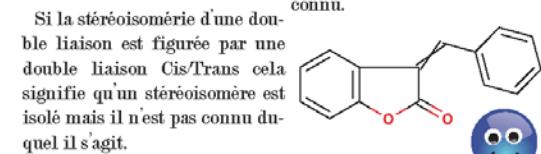
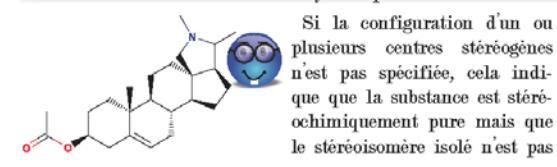
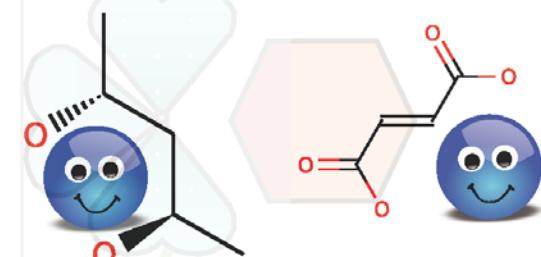


2 3

Croisements



Stéréochimie



4

B. CHANGEMENT DE LA VERSION 1.5

Cette version a réalisé par [Jordi Marzo](#) et Laurent ROBIN

1. AJOUTS :

- Alerte doublon ;
- Wiki accessible depuis L-g Chimio ;
- Exportation multicritères (CSV/SDF) ;
 - Choix du format du fichier ;
 - Choix des filtres de sélection ;
 - Choix des champs à exporter ;
- Possibilité d'attribution des molécules par les administrateurs ;
- Module d'importation (SDF/RDF) ;
- Exportation via le module de recherche ;
- Date d'envoi chez Evotec ;
- Tag Evotec insoluble ;
- Contrôle de la structure ;
- Contrôle de la pureté ;
- Désactivation automatique des comptes chimiste (1 an après l'activation) ;
- Choix des champs obligatoires.

2. MODIFICATIONS :

- Renforcement de la sécurité ;
- Modification de l'interface utilisateur ;
- Modification de la structure de la base de données ;
- Augmentation de la taille limite pour les envois de fichiers et de logo ;
- Correction de bug d'affichage de Mol v3000 ;
- Correction de bug lors de l'insertion des numéro CN ;
- Correction de bug lors de l'insertion de fichier CSV dans les résultats bio ;
- Correction de bug lors de la modification du mot de passe par un chimiste ;
- Correction de bug lors de l'insertion de CSV pour les tags Evotec ;
- Amélioration de la partie téléchargement fichier pour les résultats d'analyses(Spectrométrie, RMN).