



---

**METABOHUB WP1 / WP3**  
**PEAKFOREST**  
**Numérotation des molécules - v 1.0**

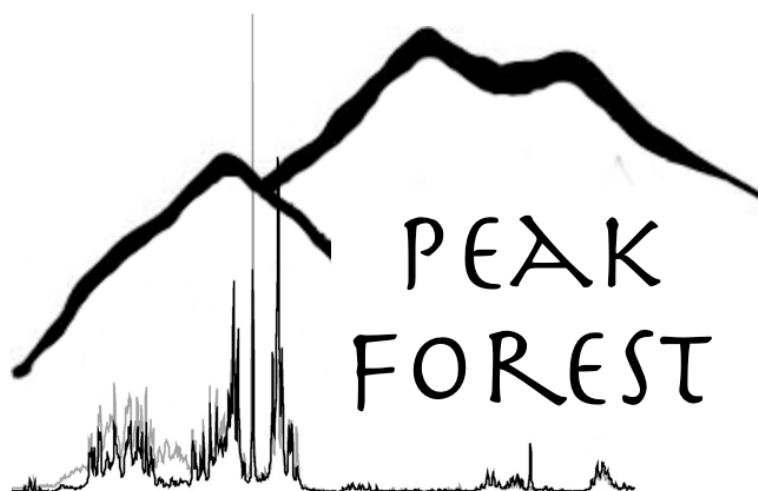
---

Documentation d'ajout de structures numérotées dans PeakForest.

---

Autrice : Cécile Canlet

Date : 16 février 2016



### Consignes pour la numérotation des molécules (dans la mesure du possible) :

1. Numéroté la chaîne hydrocarbonée la plus longue, en commençant par la fonction prioritaire dans la norme IUPAC ( $\text{COOH} > \text{COOR} > \text{CONH}_2 > \text{CN} > \text{CHO} > \text{C=O} > \text{OH} > \text{NH}_2 > \text{X} > \text{C}_x\text{H}_y$ ), pouvant passer par des hétéroatomes (e.g. pont disulfure du glutathion oxydé).
2. Numéroté ensuite les chaînes latérales en respectant la priorité des fonctions. Si plusieurs possibilités pour la numérotation des ramifications ou des substitutions, prendre celle pour laquelle la somme des indices est la plus faible.
3. Les atomes d'azote, de phosphore, seront également numérotés. Les atomes d'hydrogène, d'oxygène, de soufre ne seront pas numérotés.
4. Éviter les caractères spéciaux comme des primes dans la numérotation. Pour les protons portés par un carbone voisin d'un carbone asymétrique, c'est-à-dire magnétiquement différents, ils porteront le même numéro sur la molécule, ils seront ensuite différenciés dans le tableau d'annotation RMN par a et b.
5. Si le composé étudié est un mélange de plusieurs formes (pyranose ou furanose ; alpha ou beta), comme c'est le cas pour les sucres, il ne sera pas possible de visualiser en 3D la molécule numérotée. **Pour pouvoir visualiser une molécule numérotée en 3D, il faut charger une seule structure numérotée (format MDL molfiles [V3000]).** Dans le cas de composés présentant uniquement les formes alpha-pyranose et beta-pyranose (ou alpha-furanose et beta-furanose), par exemple le D-Glucose, il suffit de dessiner la molécule sans indiquer la stéréochimie du carbone anomérique. Dans le cas d'un mélange des quatre formes citées ci-dessus, la structure ne sera pas visualisable en 3D, mais le sera en 2D (format png). Pour cela, dessiner les différentes formes de la molécule en les nommant alpha-pyranose ; beta-pyranose ; alpha-furanose et beta-furanose et sauvegarder le fichier en format png. La molécule numérotée sera visualisée en 2D.
6. Utiliser le logiciel gratuit ACDLab/ChemSketch, (pour les payant, ChemDraw par exemple).
7. Numéroté la molécule en respectant les consignes ci-dessus.
8. Sauvegarder le fichier en format png (\*.png, résolution au minimum de 300 dpi) et MDL molfiles [V3000] (\*.mol).  
Remarque : le format svg n'existe pas dans ce logiciel !  
**Attention : Ne pas sauvegarder le fichier en format mol [V2000] ! Seul le format [V3000] permet d'obtenir la numérotation en 3D.**
9. Dans PeakForest, il faut se logger pour pouvoir charger le fichier de molécule. Cliquer sur le nom du composé choisi (ou télécharger le fichier excel du composé si celui-ci n'existe pas dans PeakForest, cf. documentation d'ajout d'un composé). Dans la partie « structure », cliquer sur l'onglet « Nb » et « téléchargement Nb », puis sur « Browse ». Choisir le fichier correspondant soit .png, soit .mol, soit les deux. Il est possible de charger dans PeakForest un fichier image (.png), et un fichier mol.