



MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE BATNA-1
FACULTE DES SCIENCES DE LA MATIERE
DEPARTEMENT DE CHIMIE



**EXTRAIT DU PROCES VERBAL DE REUNION
DU COMITE SCIENTIFIQUE DE DEPARTEMENT N°5/2024**

L'an deux mille vingt quatre, le cinq du mois d'Décembre, s'est tenu une réunion ordinaire du Comité Scientifique du Département de Chimie à dix heures.

II-2- Expertise de polycopié

Le comité scientifique a pris connaissance des rapports d'expertise de polycopiés concernant l'enseignante suivante :

Dr. LAIB Souhila ; « Informatique pour la chimie I »
Troisième année Licence Chimie physique (Semestre 6).

Les experts désignés (CSD N°2/2024 du 07/10/2024), Dr. ZIADI Kamel (Université de Batna 1), Dr. MASMOUDI Rida (Université de Batna 1) et Dr. CHAFAA Fouad (Université de Batna 2) ont émis des rapports positifs.

Le comité a émis un avis favorable à sa diffusion comme support pédagogique.

La séance a été levée à 11 heures et deux minutes.

La Présidente du Comité Scientifique

Signature et sceau officiel de la Présidente du Comité Scientifique. Le sceau est circulaire et contient le texte : "جامعة باتنة 1" (Université de Batna 1), "اللجنة العلمية" (Comité Scientifique), "قسم الكيمياء" (Département de Chimie). La signature est écrite en bleu et est accompagnée d'un grand trait de plume.

République Algérienne Démocratique et Populaire



Ministère de l'Enseignement Supérieur
Université de BATNA 1



Faculté des Sciences de la Matière
Département de Chimie



Polycopié de Cours

Filière Chimie

3^{ème} Année LMD Chimie Physique

5^{ème} Semestre

Matière

« Informatique pour la Chimie I »

Présenté par : Dr. LAIB Souhila

2024/2025



République Algérienne Démocratique et Populaire

**Ministère de l'Enseignement Supérieur
Université de BATNA 1**



**Faculté des Sciences de la Matière
Département de Chimie**

Polycopié de Cours

Filière Chimie

3^{ème} Année LMD Chimie Physique

5^{ème} Semestre

Matière

« Informatique pour la Chimie I »

Présenté par : Dr. LAIB Souhila

2024/2025

AVANT- PROPOS

Ce polycopié a pour but de fournir les concepts de base, les outils informatiques et les différentes méthodes de traitement des données issues des différents domaines de la chimie. Il est destiné aux étudiants de troisième année licence de chimie physique ainsi que pour toute personne intéressée. L'objectif de ce polycopié de cours est de permettre aux étudiants de connaître les fondements de la science informatique, de comprendre, d'expliquer et de prédire les propriétés physiques, chimiques et biologiques des composés et des matériaux à l'échelle de l'atome et de la molécule dans tous les secteurs de l'activité humaine. Ce polycopié est divisé en quatre chapitres. Le premier chapitre est consacré à une introduction à la chimie informatique. Dans le deuxième chapitre, nous présentons les notions générales sur les systèmes d'exploitation tels que Windows, MacOS, MS-Dos, Linux, Unix et les logiciels de bureautique Microsoft tels que Microsoft Word, Microsoft Excel et Microsoft PowerPoint. Le troisième chapitre porte sur le traitement statistique des données expérimentales et les différents types de graphes pour le traitement graphique...etc. Le quatrième chapitre comporte la représentation et la visualisation des molécules, les bases de données, les logiciels utilisés pour la représentation des molécules en 2D et les logiciels utilisés pour la visualisation en 3D tels que ChemDraw, ChemSketch, GaussView, Chemcraft, Avogadro...etc.

Description

Ce module a pour objectif de fournir à l'étudiant les notions fondamentales en chimie informatique et computationnelle :

- Qu'est-ce qu'une molécule ?
- Qu'est-ce qu'une base de données ?
- La visualisation d'une molécule.
- La résolution de structures moléculaires.

Auteur

Dr. LAIB Souhila, Université de Batna 2.

E-mail : s.laib@univ-batna2.dz

Public cible*

Ce cours est destiné aux étudiants de troisième année Chimie Physique (L3) ainsi que pour toute personne intéressée.

Objectifs de cours

- Acquérir des notions fondamentales en chimie informatique.
- Connaître les outils informatiques pour le traitement des données issues des différents domaines de la chimie.
- Comprendre la géométrie des molécules.
- Comprendre, expliquer et prédire les propriétés physiques, chimiques et biologiques.
- Apprendre et comprendre les étapes de traitement statistique et graphique des données expérimentales.

Pré-requis

- Chimie informatique, Chimie théorique, Chimie computationnelle, Chimie pharmaceutique.

Table de Matières

I. Introduction à la chimie informatique.....	1
I.1 Introduction.....	1
I.2 Définition.....	1
I.3 Historique.....	1
I.4 Méthode scientifique.....	1
I.5 Objectifs.....	2
I.6 Champs d'applications	2
I.6.1 Acquisition des données biologiques.....	2
I.6.2 Modélisation moléculaire.....	2
I.6.3 Dans la conception des médicaments.....	2
I.6.4 Dans la Chimie analytique.....	2
I.7 Problématique.....	3
II. Notions générales sur les systèmes d'exploitation.....	4
II.1 Définitions.....	4
II.1.1 Un ordinateur.....	4
II.2 Les systèmes d'exploitation.....	4
II.2.1 Hardware.....	5
II.2.2 Software.....	5
II.3 Les différents systèmes d'exploitation.....	6
II.3.1 Le système d'exploitation Windows.....	6
II.3.1.1 Les versions.....	6
II.3.1.2 Le bureau Windows.....	7
II.3.2 Le système d'exploitation MacOS.....	13
II.3.2.1 Les applications.....	13
II.3.2.2 Les avantages.....	13
II.3.3 Le systèmes d'exploitation MS-Dos.....	13
II.3.3.1 Le rôle du systèmes d'exploitation MS-Dos.....	13
II.3.4 Le systèmes d'exploitation Linux.....	14
II.3.4.1 Histoire de Lunix.....	14
II.3.4.2 Les avantages et les Inconvénients de Lunix.....	15
II.3.4.3 Domaines d'utilisation de Linux.....	15
II.3.5 Le système d'exploitation Unix.....	15

II.3.5.1 Structure du système Unix.....	16
II.3.5.2 Les avantages de Unix.....	17
II.4 Utilisation Windows vs Linux.....	17
II.5 Avantages et Inconvénients de quelque système d’exploitation.....	17
II.6 Logiciels de bureautique Microsoft.....	18
II.6.1 Microsoft Word.....	19
II.6.1.1 La fenêtre de l’application.....	19
II.6.1.2 La barre d’outils (Accès rapide).....	19
II.6.1.3 Le Ruban.....	20
II.6.1.4 La Barre d’état.....	22
II.6.2 Microsoft Excel.....	23
II.6.2.1 Le Ruban.....	23
II.6.2.2 Le classeur.....	23
II.6.2.3 Les cellules.....	24
II.6.2.4 Les graphiques.....	25
II.6.3 Microsoft Power Point.....	26
II.6.3.1 Le rôle du logiciel Powerpoint	27
II.6.3.2 Créer votre présentation.....	27
II.6.3.3 Présenter votre Powerpoint.....	28
II.6.3.4 Présenter votre diaporama PowerPoint.....	29
II.6.3.5 Ajouter des animations.....	29
II.7 Microsoft OneNote.....	30
II.8 Microsoft Publisher	33
II.9 Microsoft Outlook.....	38
II.9.1 Le rôle de Microsoft Outlook	39
II.9.2 Découverte de l’écran.....	39
II.9.3 Les avantages de Microsoft Outlook.....	45
II.9.4 Les inconvénients de Microsoft Outlook.....	45
II.10 Libre Office.....	45
II.10.1 Découverte de l’écran.....	46
Applications.....	53
III. Traitement statistique et graphique de données expérimentales.....	55
III.1 Introduction.....	55

III.2 Champ d'application.....	55
III.3 Concepts et méthodes.....	55
III.4 Démarche et principales étapes dans le domaine de chimie.....	56
III.5 Problématiques.....	56
III.6 Traitement statistique des données expérimentales.....	56
III.6.1 Définition.....	56
III.6.2 La Simulation.....	56
III.6.3 Le développement d'un modèle.....	56
III.7 Les outils informatiques de traitement statistique.....	57
III.7.1 Le logiciel SAS.....	57
III.7.2 Le logiciel R.....	57
III.7.3 SPSS.....	58
III.7.4 SPAD.....	58
III.7.5 XLSTAT.....	59
III.7.6 STATGRAPHICS.....	59
III.7.7 MINI-TAB.....	60
III.7.8 Autres logicielles.....	60
III.8 L'objectif du traitement graphique des données expérimentales.....	65
III.8.1 Les graphes.....	65
III.8.2 Les différents types de graphes.....	65
III.8.2.1 Diagramme à bande.....	65
III.8.2.2 Contexte.....	65
III.8.3.3 Angles et mesures.....	66
III.8.3.4 Volumes et mesures.....	66
III.8.3.5 Diagrammes en bâtons.....	66
III.8.4 Le rôle des graphiques.....	66
III.9 Les outils informatiques utilisés dans la chimie.....	67
III.9.1 Etudes des propriétés moléculaires.....	67
III.10 Logiciels utilisés pour la prédiction des propriétés moléculaires.....	67
III.11 Logiciels utilisés pour la prédiction des propriétés biologiques.....	73
Applications.....	79
IV. Représentation et visualisation de molécules.....	80
IV.1 Introduction.....	80

IV.2 Historique.....	80
IV.3 Problématique.....	80
IV.4 Objectif.....	81
IV.5 Qu'est-ce qu'une molécule.....	81
IV.6 Représentation des composés chimiques.....	81
IV.7 Visualisation d'une molécule.....	81
IV.7.1 Visualisation d'une molécule au microscope.....	82
IV.7.2 Visualisation d'une molécule passe par la construction des modèles.....	82
IV.7.2.1 Représentation d'une molécule.....	82
IV.8 L'importance de la visualisation moléculaire.....	85
IV.9 Bases de données.....	86
IV.9.1 Historique.....	86
IV.9.1.1 Premiers développements.....	86
IV.9.1.2 Premiers supports informatiques.....	86
IV.9.1.3 État actuel.....	86
IV.9.2 Les éléments constitutifs d'une base de données.....	86
IV.9.3 Les avantages et les inconvénients des bases de données.....	86
IV.9.3.1 Les avantages.....	86
IV.9.3.2 Les inconvénients.....	87
IV.9.4 Les différents types de bases de données.....	87
IV.9.4.1 Bases de données généralistes.....	87
IV.9.4.2 Bases de données spécialistes.....	90
IV.10 Logiciels utilisés pour la représentation des molécules (Structures 2D).....	91
IV.11 Logiciels de la visualisation des structure 3D.....	93
IV.12 Domaines d'utilisation les logiciels de la visualisation moléculaire.....	99
IV.12.1 Dans la dynamique moléculaire.....	99
IV.12.2 Dans la modélisation moléculaire.....	99
IV.12.3 Dans l'analyse des interactions moléculaires.....	101
IV.12.4 Dans la conception des séquences.....	102
IV.12.5 Dans l'amarrage des protéines.....	102
IV.12.6 Dans la catalyse.....	103
IV.12.7 Dans le criblage virtuel.....	103
IV.12.8 Dans la pharmacographie.....	103

Applications	104
Ressources d'aide	107

I. Introduction à la chimie informatique :

I.1 Introduction :

L'informatique est très utilisée dans plusieurs secteurs. Le traitement informatique est très complexe et nécessite d'importantes bases de données qui permettent de donner des résultats très précisés.

I.2 Définition :

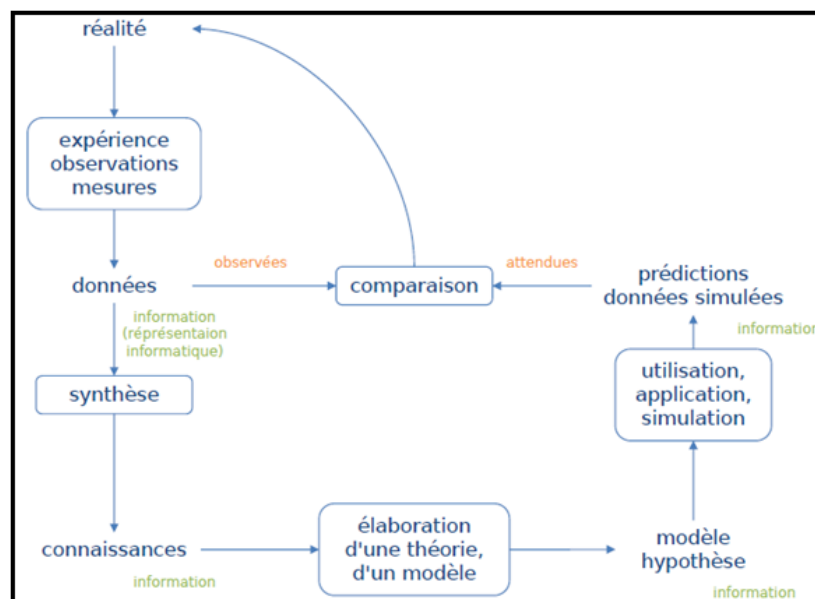
L'informatique de la chimie c'est l'utilisation des programmes informatiques pour résoudre les problèmes de la chimie.

I.3 Historique :

- ✚ **En 1935** : Introduction de la mécanique quantique avec des applications de chimie de Pauling et Wilson.
- ✚ **Chimie Quantique** : Walter et Kimball en **1944**.
- ✚ **Mécanique élémentaire des ondes** : Avec des applications de la chimie quantique de Heitler en **1945**.
- ✚ **Valence de Coulson** : En **1952**.

I.4 Méthode scientifique :

Ce diagramme représente les étapes pour la résolution des données expérimentales.



I.5 Objectifs :

- ❖ Prédire et traiter les données expérimentales.
- ❖ Développer les outils informatiques.
- ❖ Interpréter les résultats obtenus des systèmes moléculaires.

I.6 Champs d'applications :

I.6.1 Acquisition des données biologiques :

- ❖ Les données de puces à ADN.
- ❖ Les données de structures tridimensionnelles.

I.6.2 La modélisation moléculaire :

La modélisation moléculaire nous permet de traiter des systèmes moléculaires contenant plus d'atomes (De grandes surfaces moléculaires, les protéines...etc).

Elle permet aussi de prédire les propriétés physico-chimiques chimiques et biologiques (La réactivité chimique, la stabilité énergétique, les spectres IR, RMN, UV-Visible...etc).

Il existe plusieurs méthodes de calculs dans la modélisation moléculaire :

- ❖ La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).
- ❖ Etats excités-théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFT).
- ❖ La méthode Hartree-Fock.
- ❖ La méthode Post- Hartree-Fock.
- ❖ Les méthodes semi-empiriques.
- ❖ Les méthodes *ab-initio*.

I.6.3 Dans la conception des médicaments :

La chimie informatique est très importante dans le développement et la conception des médicaments par l'utilisation de plusieurs méthodes théoriques, tels que : *QSAR*, l'analyse *in silico*, le docking moléculaire...etc.

I.6.4 Dans la chimie analytique :

La chimie informatique permet de traiter les informations issues de données expérimentales de la chimie analytique (Les potentiels redox, l'effet du solvant sur les mécanismes réactionnels...etc).

I.7 Problématiques :

Le domaine de la chimio-informatique est très complexe. Il joue un rôle très difficile pour résoudre les problèmes de l'information chimique, tels que le stockage des données expérimentales, la détermination des états de transition des mécanismes réactionnels, l'analyse des grosses molécules, la conception de nouveaux médicaments, la réduire du temps et le cout de développement de nouveaux produits biologiques...etc.

II. Notions générales sur les systèmes d'exploitation :

II.1 Définitions :

II.1.1 Un ordinateur :

L'ordinateur est un appareil très puissant permettant de traiter les informations avec une précision très élevée. Il est divisé en deux parties :

❖ **La partie matérielle :**



❖ **La partie logicielle :**



II.1.2 Un algorithm :

C'est l'écriture des opérations mathématiques se forme d'un langage de programmation.

II.2 Les systèmes d'exploitation :

Le système d'exploitation est une famille de logiciels noté **SE** ou **OS** (Operating System) est présent dans divers appareils électroniques :

❖ Les ordinateurs avec Windows, MacOS, GNU/Linux, Unix...etc.

II.3 Les différents types systèmes d'exploitation :

II.3.1 Le système d'exploitation Windows :



Pour les PC, développé il y a environ 35 ans par Microsoft, il est le système le plus utilisé au monde.

- ❖ Il permet de personnaliser le poste de travail.
- ❖ L'Explorateur Windows aide l'utilisateur à gérer les supports informatiques et les fichiers.
- ❖ Il permet de créer des dossiers et des sous dossiers.
- ❖ Il permet de faire des copies de fichiers et de dossiers.

II.3.1.1 Les versions :

Voir Tableau II-1.

Tableau II-1 : Les versions de Windows.

Branche 16 bits	Branche 32 bits	Branche Windows NT	Branche Windows CE
-Windows 1.0 : Novembre 1985. -Windows 2 : Décembre 1987. -Windows 2.10 pour 286 : Décembre 1987. -Windows 2.10 pour 386 : Décembre 1987. -Windows 3.0 : Mai 1990. -Windows 3.1 (Janus) : Avril 1992. -Windows 3.1 (Sparta) : Octobre 1992. -Windows 3.11 (Snowball) : Novembre 1993.	-Windows95 (Chicago) : Août 1995. -Windows 98 (Memphis) : Juin 1998. -Windows 98 SE : Mai 1999. -Windows ME (Millennium Edition) : Septembre 2000.	-Windows NT 3.1 : Août 1993. -Windows NT 3.5 : Septembre 1994. -Windows NT 3.51 : Juin 1995. -Windows NT 4.0 : Août 1996. -Windows 2000 (Cairo) : Février 2000. -Windows 2000 SP1 : Août 2000. -Windows 2000 SP2 : Mai 2001. -Windows XP : Octobre 2001. -Windows 2000 SP3 : Juillet 2002. -Windows XP SP1 : Septembre 2002. -Windows XP Édition Media Center : 2002. -Windows Server 2003 : Mai 2003. -Windows 2000 SP4 : Juillet 2003. -Windows XP Starter Edition : Août 2004. -Windows XP SP2 : Août 2004. -Windows XP Home Edition N (Windows XP Édition familiale) : Avril 2005. -Windows XP 64 : Avril 2005. -Windows XP Édition Media Center 2005 : Août 2005. -Windows Vista (Longhorn) : Novembre 2006 pour les entreprises, 30 janvier 2007 pour le grand public. -Windows Server 2008 : Février 2008. -Windows XP SP3 : Mars 2008. -Windows Vista SP1 (Windows Fiji) : Mars 2008. -Windows Seven (Blackcomb/Vienna) : Attendu pour 2010.	-Windows CE 1 : Novembre 1996 -Windows CE 2 : Novembre 1997 -Windows CE 2.1 : Juillet 1998 -Windows CE 3 : 1999 -Windows CE .NET : 2000 Pocket PC 2000 : 2001 Pocket PC 2002 : 2002 -Windows Mobile 2003 : 2003 -Windows Mobile 2003 SE (Second Edition) : 2004 -Windows Mobile 5.0 (nom de code: Magneto) : 2005 -Windows Mobile 6.0 : 2007

II.3.1.2 Le bureau Windows :

Est une image d'accueil apparait sur l'écran.



❖ **Une icône** : Il existe plusieurs types des icônes :

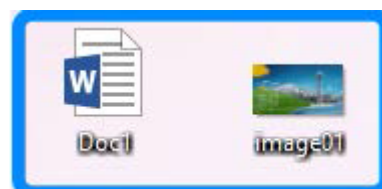
1. Les icônes de programmes :



2. Les icônes de dossiers :



3. Les icônes de fichiers :



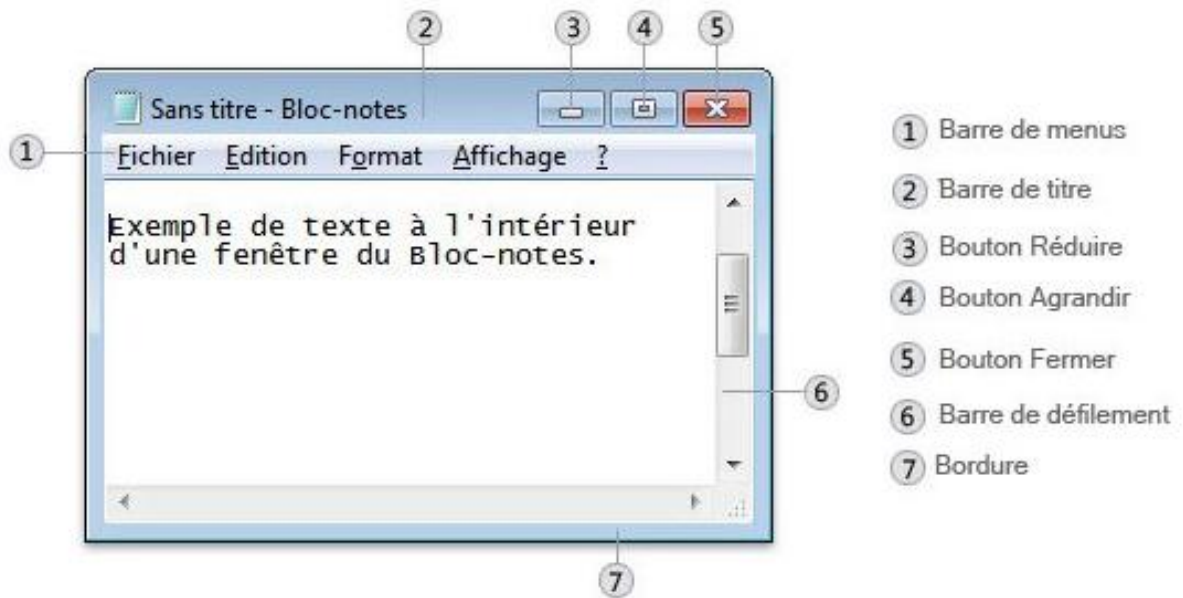
4. La corbeille :



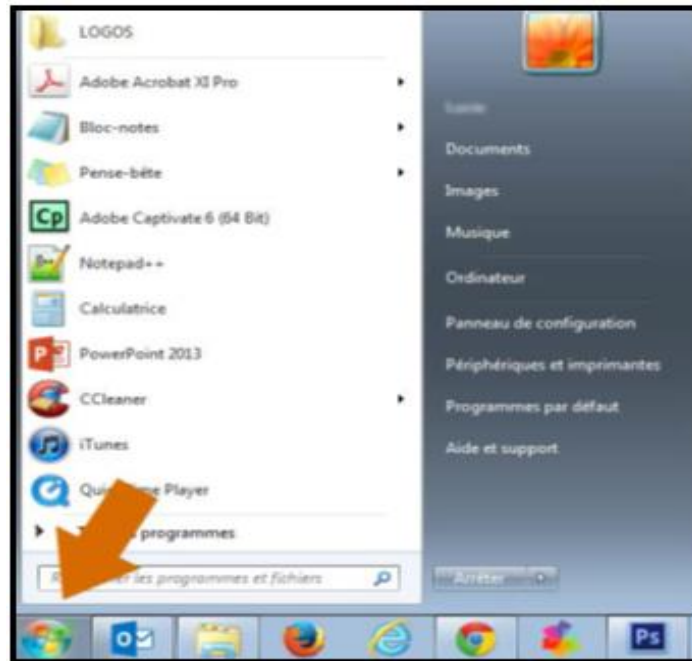
❖ **La barre des tâches** : Elle contient des icônes et un bouton Windows à gauche.



❖ **Les fenêtres** : Les fenêtres présentent une série d'éléments communs.



❖ Pour afficher les listes des programmes installés sur un ordinateur, en cliquant sur le "Menu démarrer".



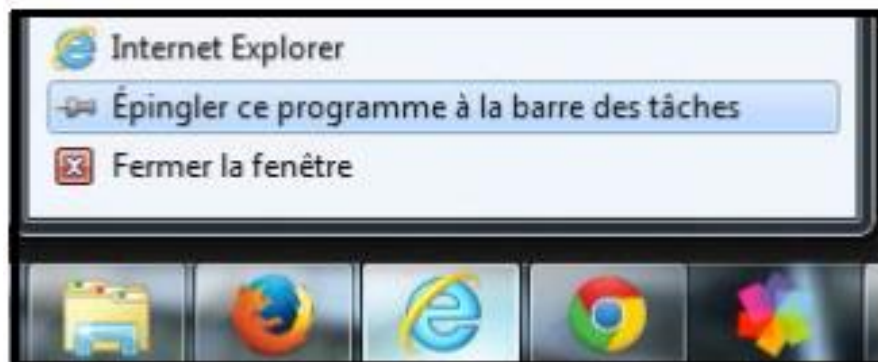
- ❖ Pour arrêter, redémarrer un ordinateur, cliquez sur ‘Alimentation’ :



- ❖ Pour fermer une application, Cliquez sur ‘x’.



- ❖ Pour ajouter un raccourci vers un programme, sélectionnez l’option ci-dessous :



❖ Zone de notification :



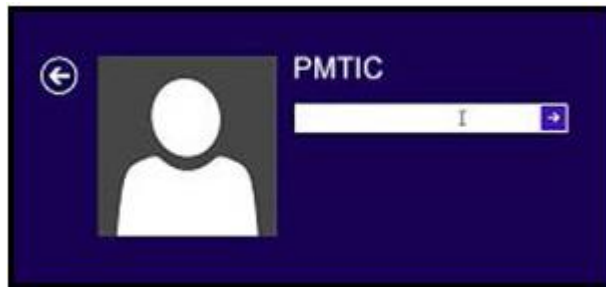
❖ Pour défiler le contenu d'une page :



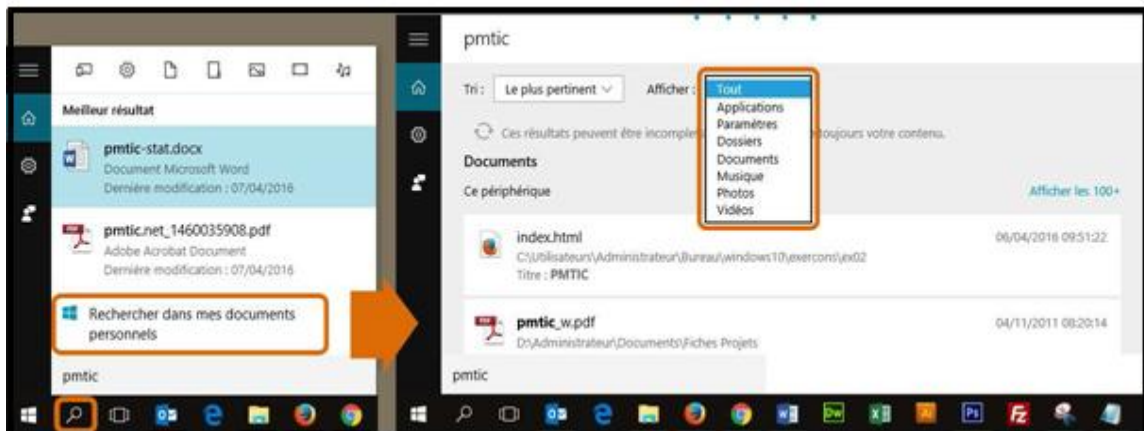
❖ Pour redimensionner une fenêtre :



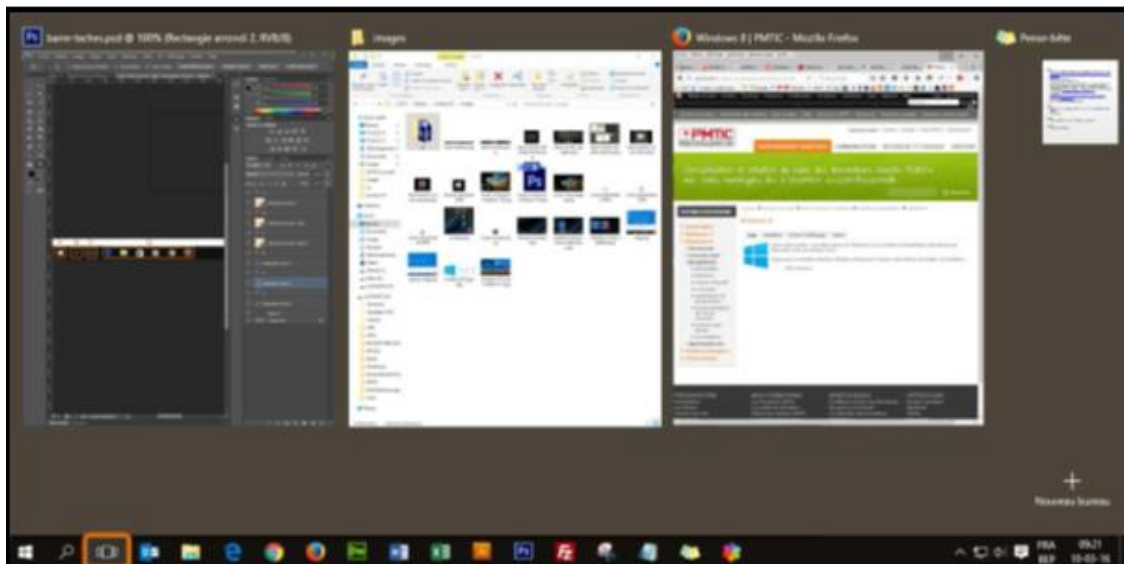
❖ **Ecran de connexion :**



❖ **Outils de recherche :** Cliquer sur la loupe, ensuite sur “Rechercher dans mes documents personnels”.



❖ **Affichage des fenêtres :**



II.3.2 Le système d'exploitation MacOS :



Le MacOS a été développé pour Macintosh en 1984. Il est essentiel pour la communication au sein des réseaux locaux.

II.3.2.1 Les applications :

L'OS fournit un ensemble d'applications :

- ❖ **Finder** : Pour parcourir les fichiers présents sur le Mac, sur iCloud.
- ❖ **Multimédia** : Musique, Podcasts, Bourse, App Store, Livres.
- ❖ **Créativité** : Photos, GarageBand, iMovie.
- ❖ **Productivité** : Pages, Numéros...etc.
- ❖ **Communication** : Mails, Messages.
- ❖ **Organisation** : Notes, Rappels, Calendrier, Contacts.

II.3.2.2 Les avantages :

- ❖ L'utilisation du MacOS est très facile.
- ❖ Le passage des données et des applications entre le Mac, iPhone, iPad et Apple Watch est très simple.
- ❖ Libre et open source.

II.3.3 Le systèmes d'exploitation MS-Dos :



Est un système d'exploitation lancé en juillet 1981 par Microsoft. Il gère les différentes opérations et interprète les commandes saisies par l'utilisateur.

II.3.3.1 Le rôle du système d'exploitation MS-Dos :

Il existe plusieurs commandes dans MS-Dos qui permettent de prendre les tâches suivantes :

- ❖ La gestion des fichiers et des répertoires.
- ❖ La mise à jour des disques.

- ✚ **En 2002** : La distribution Arch est créée. Sa particularité est qu'elle offre le rolling release (Mise à jour continue).
- ✚ **En 2004** : La distribution Ubuntu est créée par la société Canonical (Mark Shuttleworth). Elle est basée sur Debian.
- ✚ **En 2021** : Rocky Linux est créée et basée sur la distribution de Red Hat.

Exemples :

- ❖ Red Hat Linux : www.redhat.com.
- ❖ Mandrake Linux : www.linux-mandrake.com.
- ❖ SuSE Linux : www.suse.com.
- ❖ Debian : www.debian.org.
- ❖ Fedora : www.fedora.org.
- ❖ Ubuntu : www.ubuntu.com.

II.3.4.2 Les avantages et les Inconvénients de Lunix :

- ❖ **Les avantages :**
 - Généralement gratuit.
 - Généralement en open source.
 - Très stable.
 - Largement configurable.
- ❖ **Les Inconvénients :**
 - Choix de logiciels limité.
 - Barrières à l'entrée élevées pour les profanes.

II.3.4.3 Domaines d'utilisation de Linux :

- ❖ Multimédia et bureautique.
- ❖ Serveur Web, messagerie.
- ❖ C/C++, Delphi, Java, PHP....etc.
- ❖ Recherche scientifique.

II.3.5 Le système d'exploitation Unix :

Est un système d'exploitation multi-utilisateurs, multi-tâche. Il permet à un ordinateur de faire exécuter plusieurs programmes par un ou plusieurs utilisateurs.

```

other operating system(s) other than the UNIX System,
such as MS-DOS, that space MUST be reserved now.
You are about to partition hard disk 0.
Please strike ENTER when ready or DEL to cancel the installation.
The recommended default partitioning for your disk is:

  a 100% "UNIX System" partition.

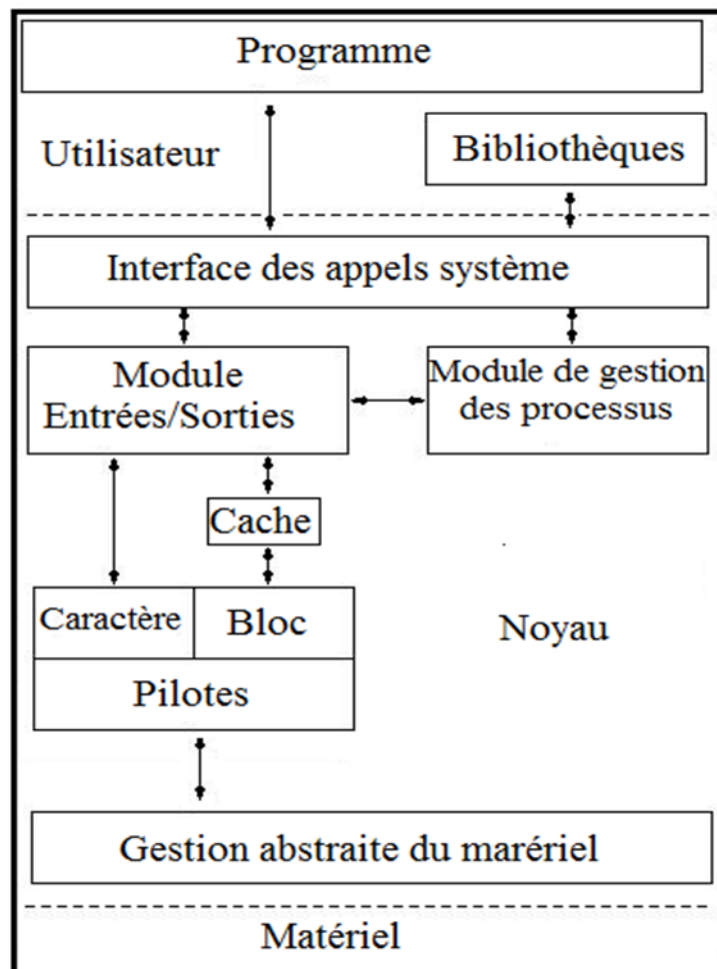
To select this, please type "y". To partition your disk
differently, type "n" and the "fdisk" program will let you
select other partitions. y

Hard disk partitioning complete.
The following hard disk elements are required and
must reside on your primary (disk 0) hard disk:
Drive  Name                Type      File System/Slice
-----  -----
0      Boot File System         bfs      /stand
0      Swap Slice               /dev/swap
0      Root File System         ufs, s5  /

Please select the File System Type for / (Root File System
) from
the following list:
      ufs, s5
Please press ENTER for the default type, ufs.
    
```

II.3.5.1 Structure du système Unix :

L'Unix est divisé en deux composantes principales du noyau, le gestionnaire du processus et la gestion des fichiers.



II.3.5.2 Les avantages de Unix :

Les systèmes Unix sont connus pour :

- ❖ Leur robustesse.
- ❖ Leur flexibilité.
- ❖ Leur adhésion à des normes ouvertes, ce qui les rend très populaires dans la recherche scientifique.

II.4 Utilisation Windows vs Linux :

Internet : Les deux se valent pour surfer sur internet, lire ses mails. Linux a moins de virus et est plus rapide.

Multimédia : Les systèmes d'exploitation Linux et Windows sont tous deux très riches en applications multimédias.

Pour une utilisation professionnelle, des logiciels propriétaires sont souvent plus performants (PhotoShop, Adobe Premiere, Lightworks, Blender, ...).

Programmation : Linux est plus performant. Il prend en charge presque tous les principaux langages de programmation (Python, C/C++, Java, Ruby, Perl...etc).

II.5 Avantages et Inconvénients de quelque système d'exploitation :

Voir Tableau II-2.

Tableau II-2 : Avantages et inconvénients de quelque système d’exploitation.

Système	Avantages	Inconvénients
<p style="text-align: center;">LINUX Système d’Exploitation gratuit Open Source de type Unix</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Possibilité d’essais sans installation via un Live CD – Puissant (car léger et très optimisé) – fiable et sécurisé, (système unix) – Pas de virus – Personnalisable à volonté. – Pas besoin d’entretien, le système peut tourner 24h/24 pendant des années sans s’engorger. – Système libre Open Source de type Unix. – Respect de votre vie privée et sécurité pour vos données. <p>Mon choix : Linux Ubuntu</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Les matériels très récents ne sont supportés qu’après plusieurs mois. – Peu de jeux. – Certains matériels exotiques nécessitent quelques recherches web pour être paramétrés.
<p style="text-align: center;">Windows 7 Windows est le système d’exploitation le plus répandu.</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Fonctionne un peu mieux que les précédentes versions. – On trouve des PCs à des prix très bas, (avec une version basique de Windows 7) 	<ul style="list-style-type: none"> – Pas de récupération des paramètres systèmes des utilisateurs, tels que les mots de passe réseau par exemple. – Système de sauvegardes pas toujours fonctionnel (pas du tout dans mon cas). – Installation obligatoire d’un anti-virus. – Système multi-utilisateurs passoire : si un utilisateur est infecté, les autres le sont aussi.

II.6 Logiciels de bureautique Microsoft :

Il existe plusieurs suites de logiciels de bureautique dont la plus connue et la plus utilisée est Office.

- ❖ Microsoft Word
- ❖ Microsoft Excel
- ❖ Microsoft PowerPoint
- ❖ OneNote
- ❖ Publisher
- ❖ Outlook
- ❖ LibreOffice

II.6.1 Microsoft Word :

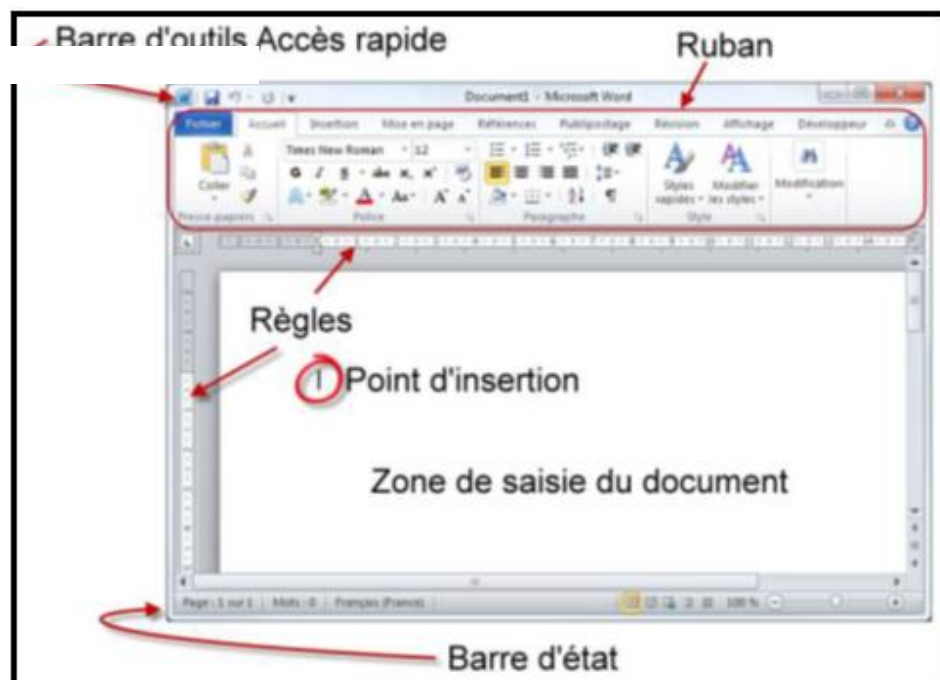
Word est l'un des logiciels de traitement de texte les plus utilisés dans le monde. Appartenant à la suite bureautique de Microsoft, Word permet de rédiger et mettre en forme des documents textes.



Il est disponible à la fois sous forme de logiciel pour Windows ou Mac, mais aussi sous forme d'application mobile, aussi bien pour iOS qu'Android.

II.6.1.1 La fenêtre de l'application :

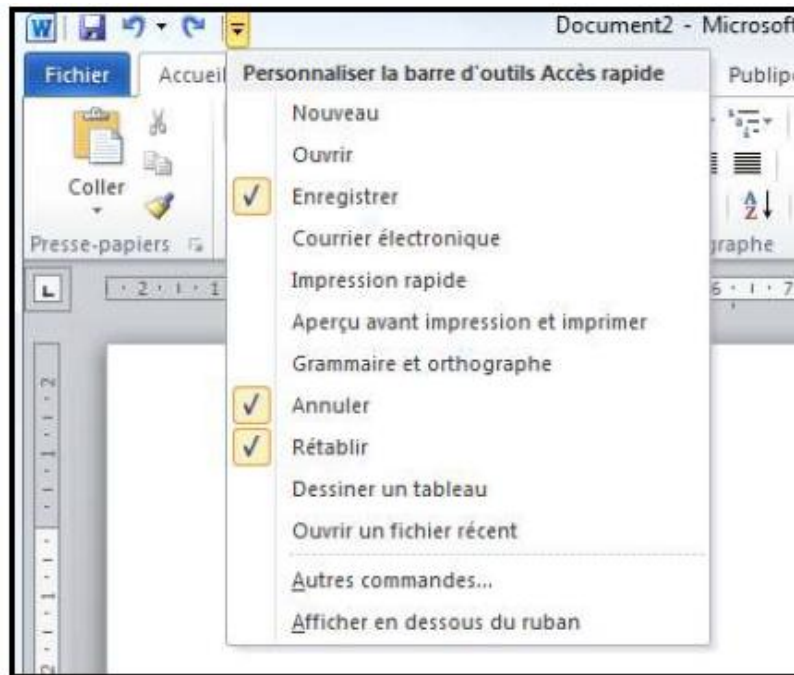
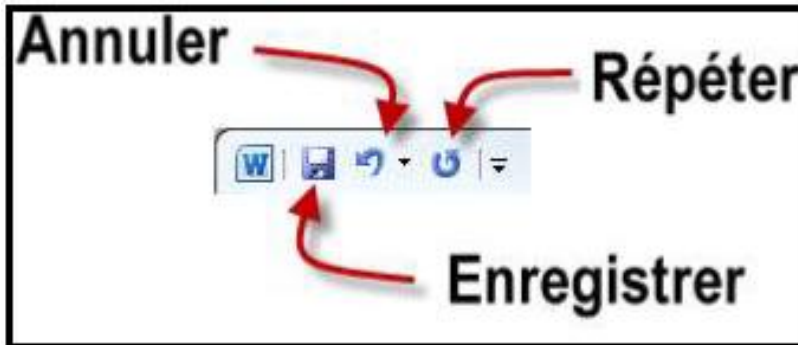
Elle constitue divers éléments :



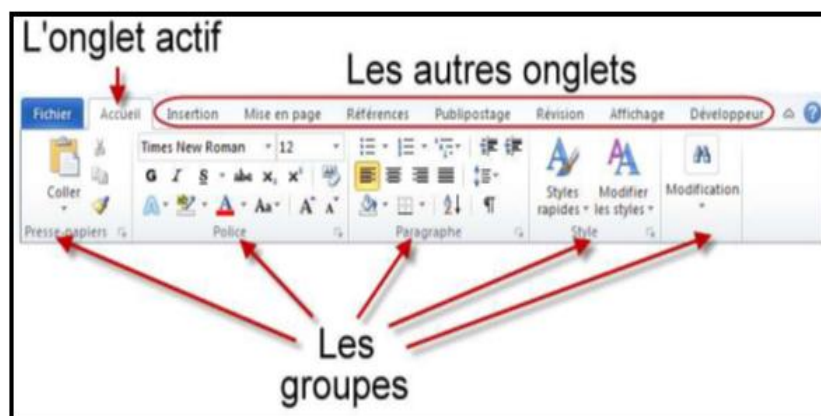
II.6.1.2 La barre d'outils :

La barre d'outils est située à gauche de la fenêtre. Elle contient trois icônes :

- ❖ Enregistrer.
- ❖ Annuler.
- ❖ Répéter.



II.6.1.3 Le Ruban :



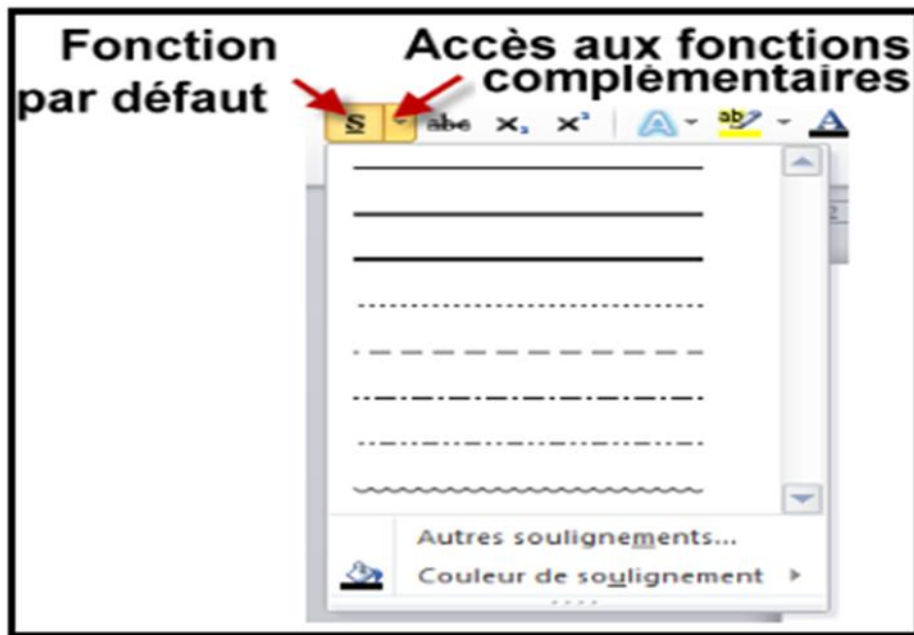
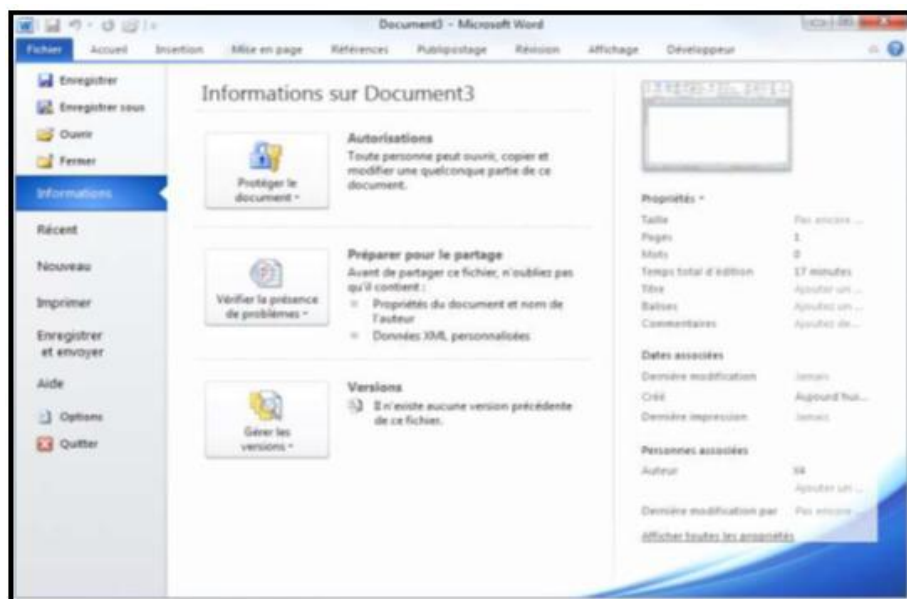


Tableau II-3 : Actions générales des différents onglets.

Accueil	Agir sur la mise en forme
Insertion	Insérer un élément dans le document
Mise en page	Agir sur la mise en page du document
Références	Insérer une référence
Publipostage	Réaliser un publipostage
Révision	Travailler en collaboration avec d'autres personnes
Affichage	Agir sur l'affichage du document sur l'écran

L'écran Backstage correspond à l'onglet 'Fichier' du Ruban. Lorsque vous sélectionnez cet onglet, cela affiche de nombreuses fonctions relatives à la gestion du document en cours d'édition :



Les fonctions regroupées dans l'écran Backstage sont centrées sur le document :

- ❖ Enregistrer.
- ❖ Enregistrer sous.
- ❖ Ouvrir.
- ❖ Fermer.
- ❖ Informations.
- ❖ Nouveau.
- ❖ Imprimer.
- ❖ Enregistrer et envoyer.
- ❖ Aide.
- ❖ Options.
- ❖ Quitter.

II.6.1.4 La Barre d'état :

La Barre d'état se trouve dans la partie inférieure de la fenêtre de Word.



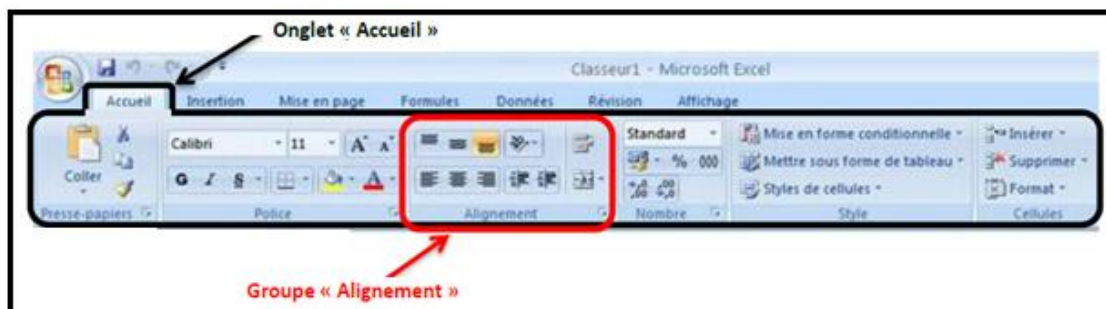
Personnaliser la barre d'état	
<input type="checkbox"/>	Numéro de page mis en forme 1
<input type="checkbox"/>	Section 1
<input checked="" type="checkbox"/>	Numéro de page 1 sur 1
<input type="checkbox"/>	Position verticale 2,4 cm
<input type="checkbox"/>	Numéro de ligne 1
<input type="checkbox"/>	Colonne 1
<input checked="" type="checkbox"/>	Statistiques 0
<input checked="" type="checkbox"/>	Nombre de modifications d'auteurs
<input type="checkbox"/>	Vérification de l'orthographe et de la grammaire
<input type="checkbox"/>	Langue Français (France) Vérification
<input checked="" type="checkbox"/>	Signatures Inactif
<input checked="" type="checkbox"/>	Stratégie de gestion des informations Inactif
<input checked="" type="checkbox"/>	Autorisations Inactif
<input type="checkbox"/>	Suivi des modifications Désactivé
<input type="checkbox"/>	Err. maj. Inactif
<input type="checkbox"/>	Befrappe Insérer
<input type="checkbox"/>	Mode de sélection
<input type="checkbox"/>	Enregistrement de macro Pas d'enregistrement
<input checked="" type="checkbox"/>	État du téléchargement
<input checked="" type="checkbox"/>	Mises à jour du document disponibles Non
<input checked="" type="checkbox"/>	Afficher les raccourcis
<input checked="" type="checkbox"/>	Zoom 120 %
<input checked="" type="checkbox"/>	Curseur de zoom

II.6.2 Microsoft Excel :

Est un programme informatique développé et distribué par Microsoft Corp. Il permet de réaliser des tâches comptables et financières grâce à ses applications pour créer et travailler avec des feuilles de calcul.

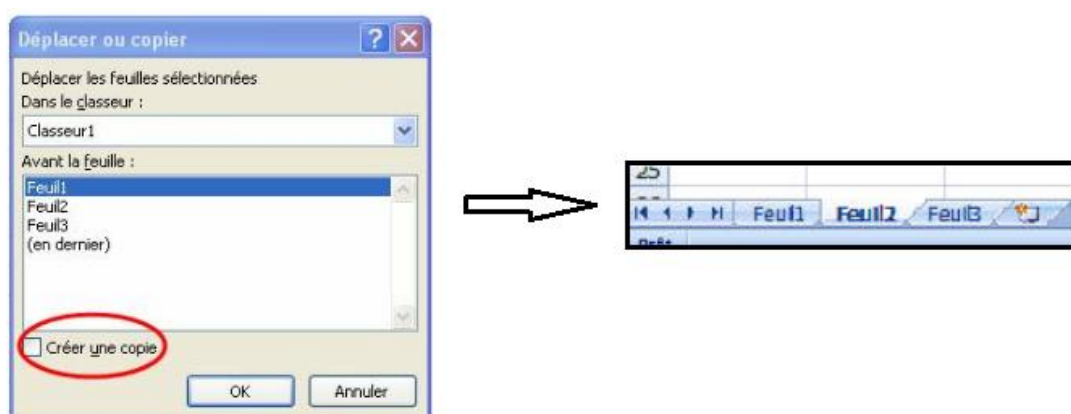


II.6.2.1 Le Ruban :



II.6.2.2 Le classeur :

Chaque fichier Excel est représenté par un classeur comportant par défaut trois feuilles.

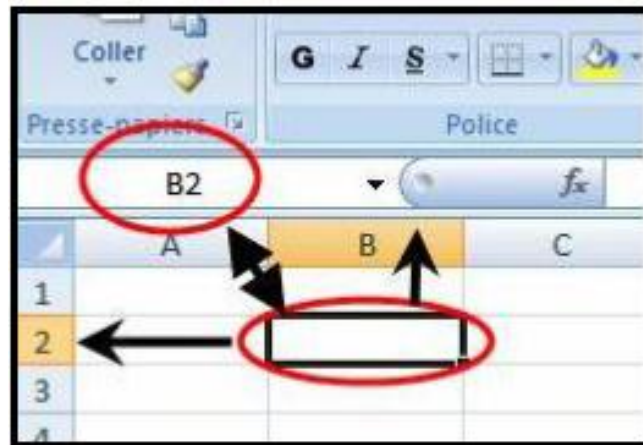


- ❖ Pour ajouter des feuilles dans un classeur, en cliquant sur le dernier onglet du classeur :

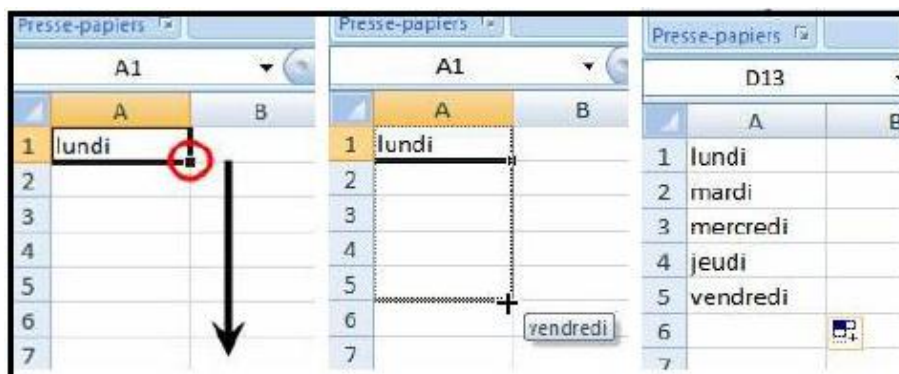


II.6.2.3 Les cellules :

Une feuille de calcul Excel est composée de colonnes (16 384) et de lignes (1 048 576).



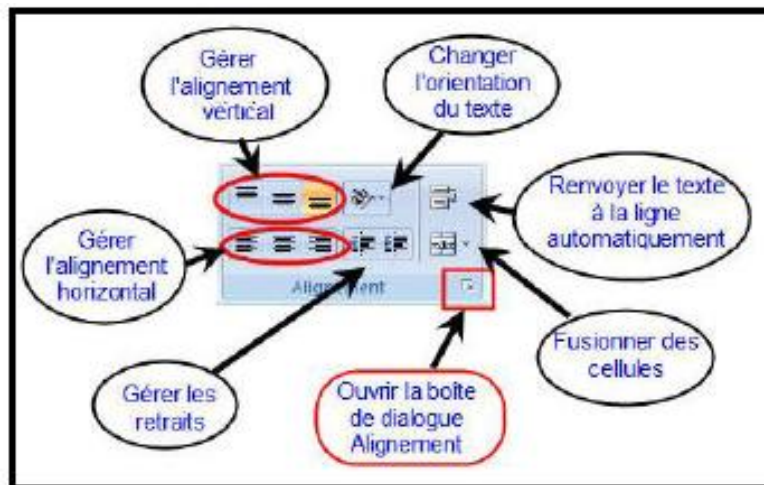
❖ L'utilisation de la poignée de recopie permet de créer des listes incrémentées.



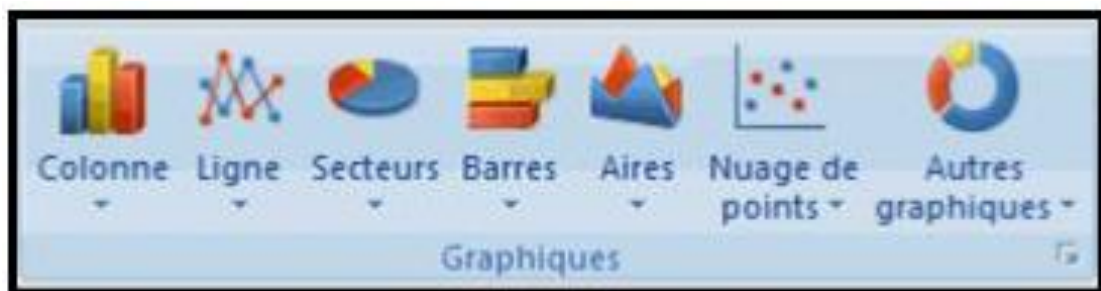
❖ Pour obtenir la liste des couleurs, en cliquant sur la flèche à droite de l'icône.



- ❖ Pour aligner le contenu dans les cellules ou faire une modification des alignements, en cliquant sur ‘Alignement de l’onglet Accueil’.



II.6.2.4 Les graphiques :

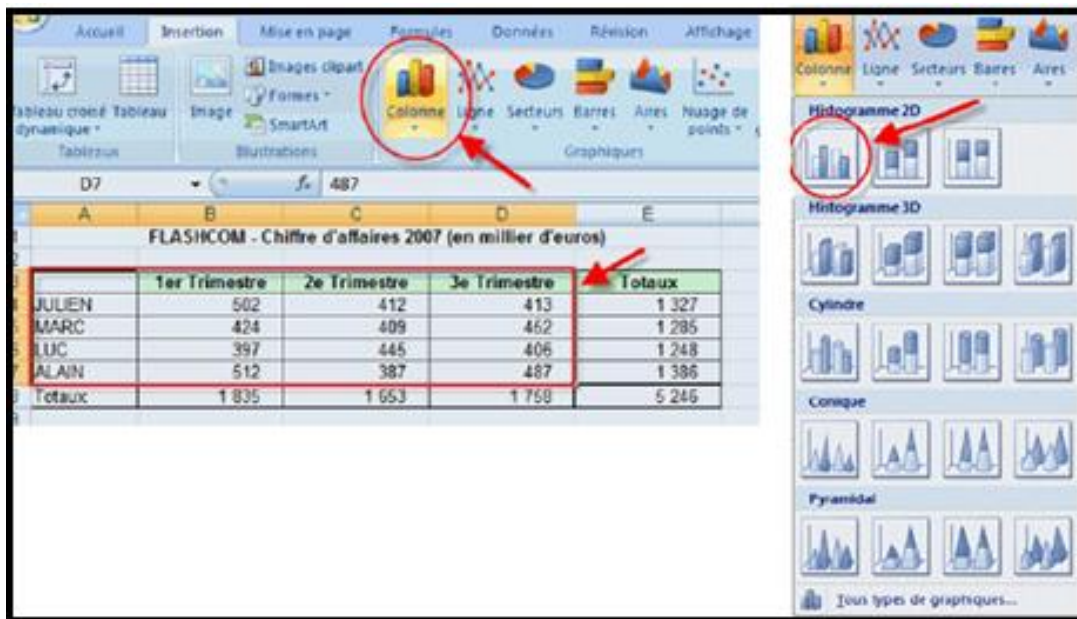


Les graphiques sont créés à partir d’un tableau dans l’Excel.

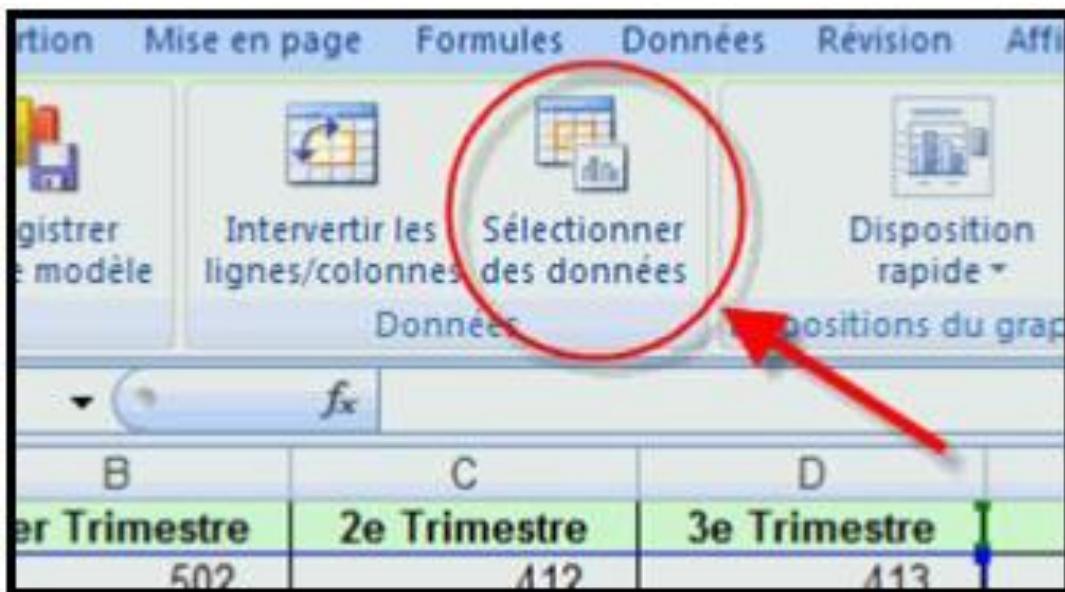
The screenshot shows an Excel spreadsheet with the following data table:

	1er Trimestre	2e Trimestre	3e Trimestre	Totaux
JULIEN	502	412	413	1 327
MARC	424	409	452	1 285
LUC	397	445	406	1 248
ALAIN	512	387	487	1 386
Totaux	1 835	1 653	1 758	5 246

Exemple :



❖ Pour ajouter un série des données, en cliquant sur “Sélectionner des données”.



II.6.3 Microsoft Power Point :

Est un logiciel permet de créer une présentation pour écran et vidéo projecteur.

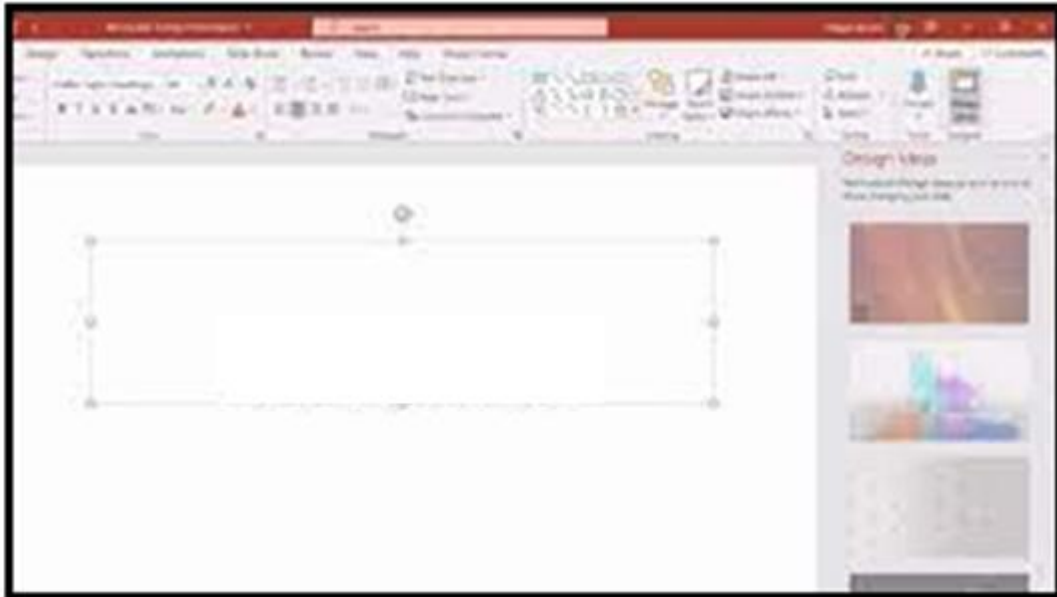


II.6.3.1 Le rôle du logiciel Powerpoint :

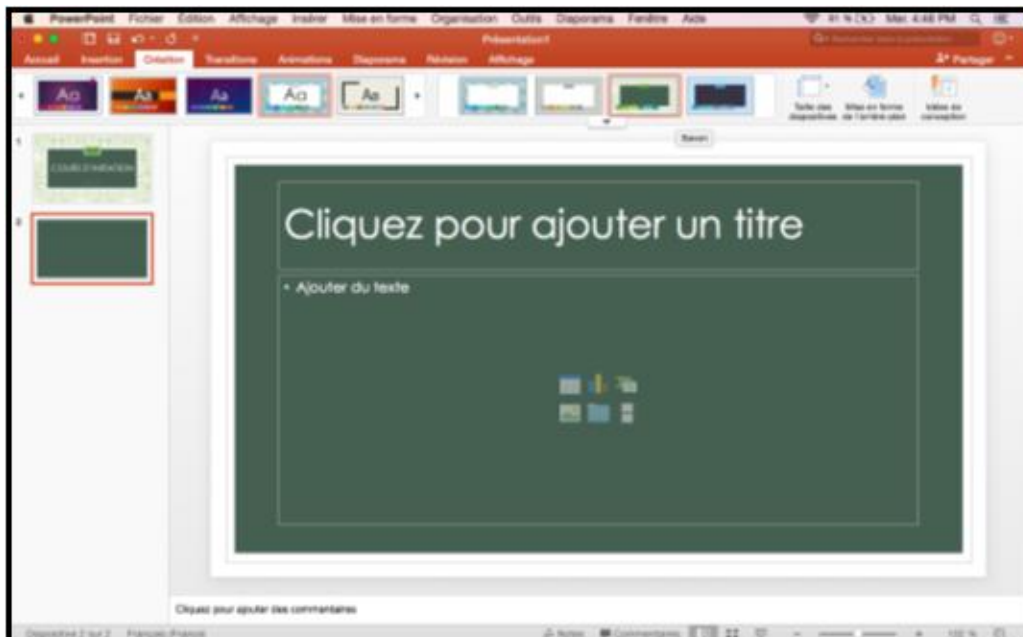
- ❖ Créer des présentations à partir d'un modèle.
- ❖ Ajouter du texte, des images, des diagrammes ou des vidéos.
- ❖ Ajouter des transitions, des animations et des mouvements.

II.6.3.2 Créer votre présentation :

- ❖ Pour ouvrir une nouvelle présentation :

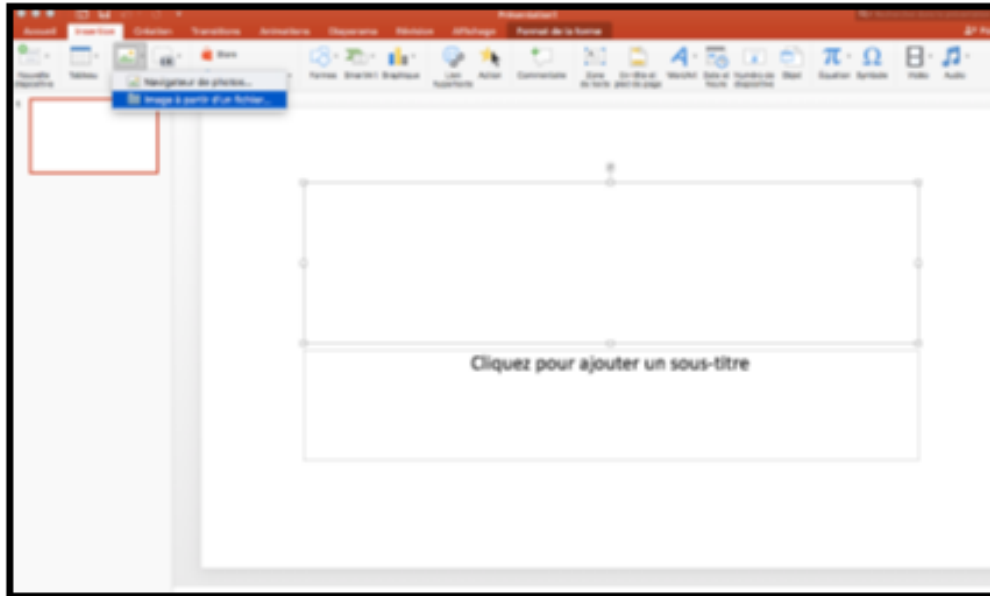


- ❖ Pour ajouter un titre ou sous-titre :

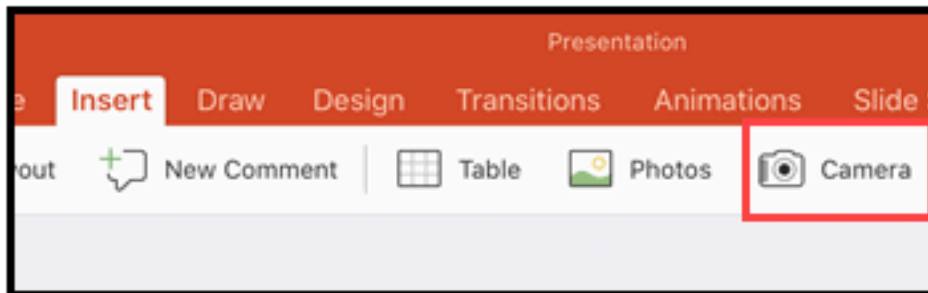


❖

- ❖ Pour ajouter une nouvelle diapositive, on sélectionne sur la flèche vers le bas de l'option 'Nouvelle diapositive'.

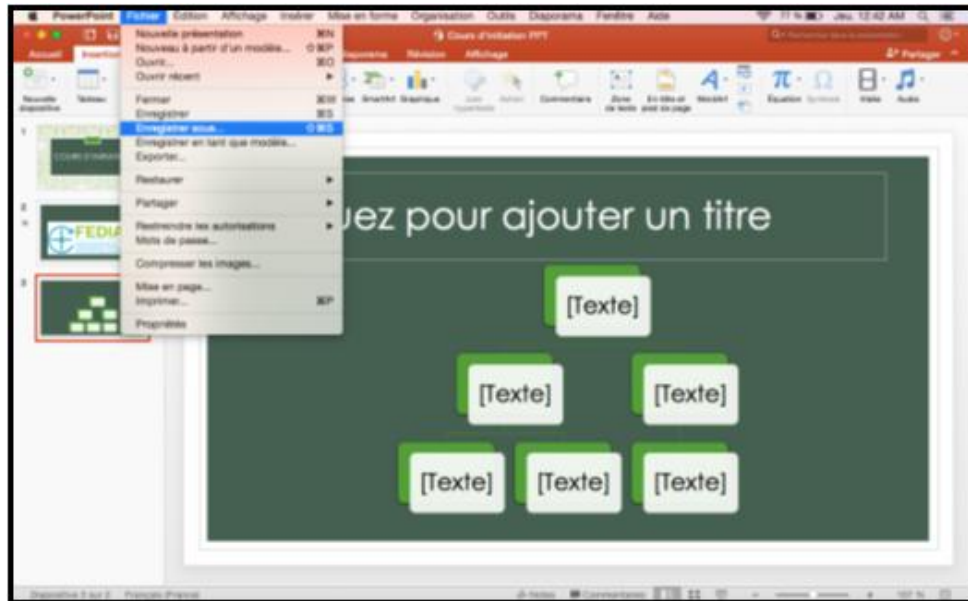


- ❖ Créer et insérer une bande sonore : Cliquez sur 'Insérer'.



II.6.3.3 Présenter votre Powerpoint :

- ❖ Pour enregistrer une présentation, on sélectionne sur 'Fichier', ensuite sur 'Enregistrer-sous'.



II.6.3.4 Présenter votre diaporama PowerPoint :

- ❖ Sélectionnez l'onglet Diaporama.
- ❖ Sélectionner la case Utiliser le mode Présentateur.



II.6.3.5 Ajouter des animations :

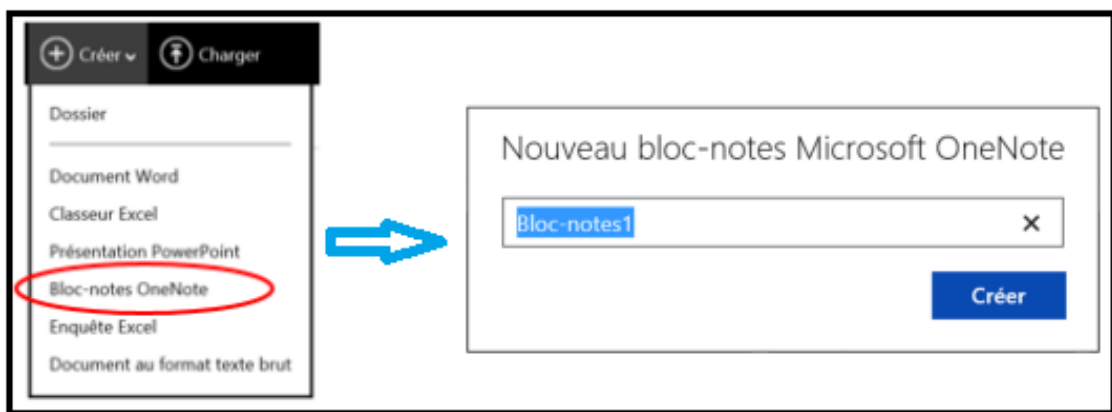
- ❖ Sélectionnez l'onglet Animations ensuite sélectionnez ce que vous voulez animer dans votre diapositive (mot, image).

II.7 Microsoft OneNote :

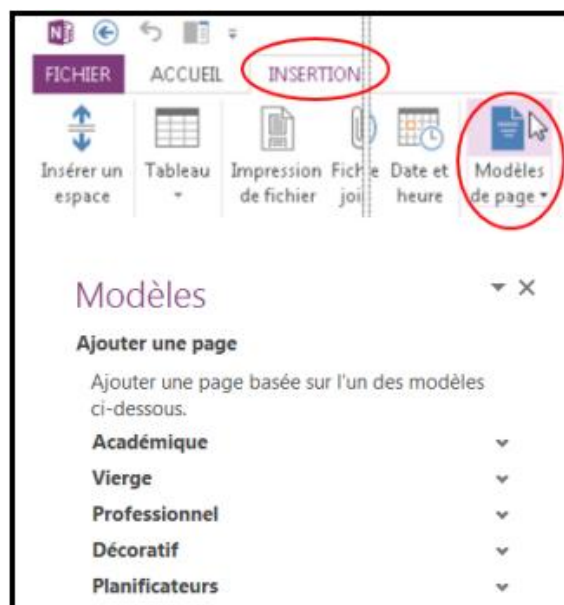


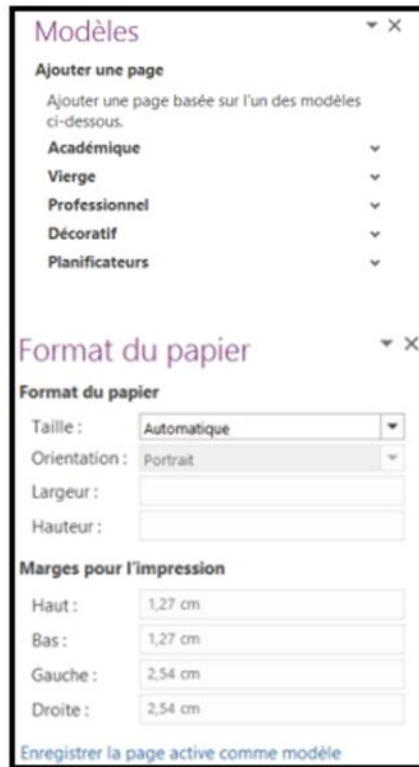
Est une application de prise de notes numérique qui fournit un emplacement unique pour conserver toutes les notes, les recherches, les plans et les informations.

❖ Création d'un bloc-notes :



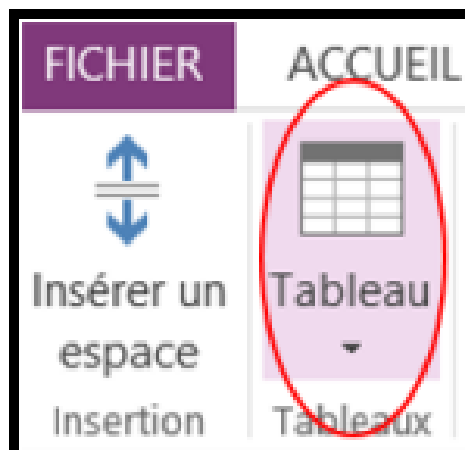
❖ Pour appliquer un modèle à une page, en cliquant sur "Insertion", ensuite sur "Modèles de pages".





❖ Pour créer un tableau dans OneNote :

- Cliquez sur Insertion puis sur tableau.
- Cliquez sur le bouton gauche de la souris pour modifier rapidement un tableau ou l'une de ses parties.



❖ Insérer une image :

OneNote inclut la possibilité d'insérer des images à partir de diverses sources. Pour insérer une image, placez d'abord votre curseur là où vous voulez que l'image disparaisse. Dans cet exemple, placez votre curseur entre le titre et le corps principal du texte dans la première page de l'exemple de notebook. Ensuite, cliquez sur Insert → pictures.

❖ Partager et collaborer avec d'autres personnes :

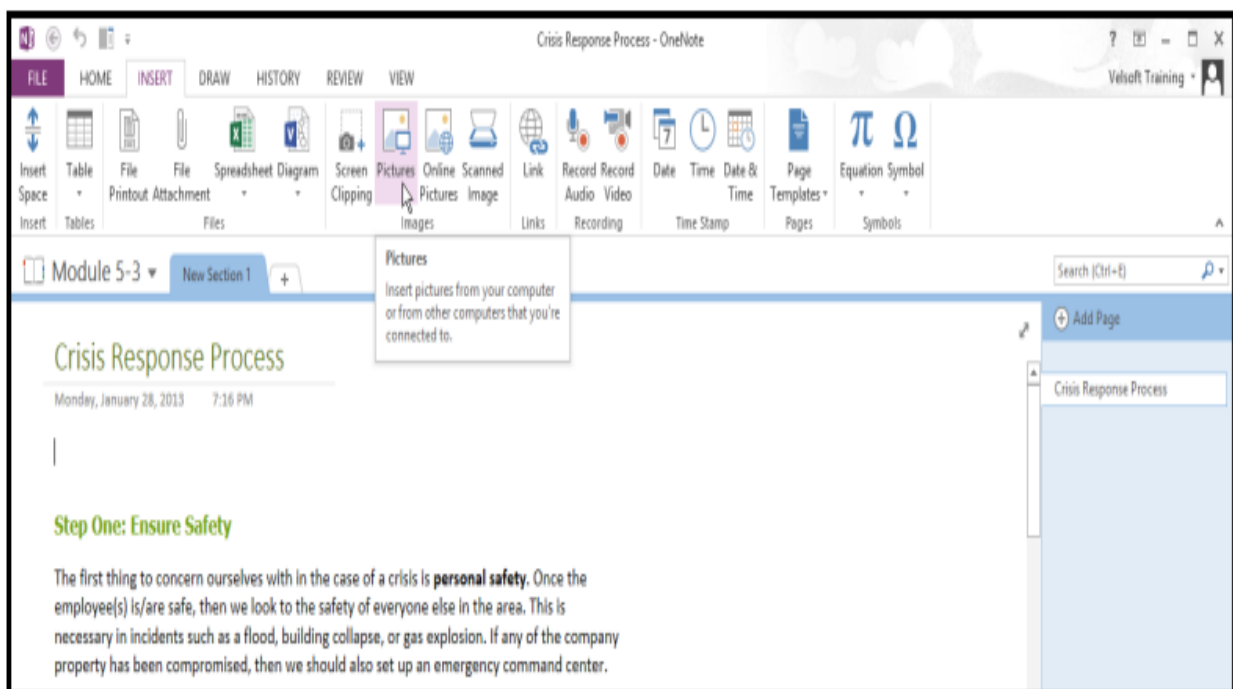
- Soit par l'invitation de d'autres personnes.
- Soit par création d'un lien vers une page de notes.

❖ Echanger avec Outlook :

- Les e-mails.
- Les tâches.
- Les rendez-vous.
- Les contacts.

❖ Prendre des notes sur Skype Entreprise :

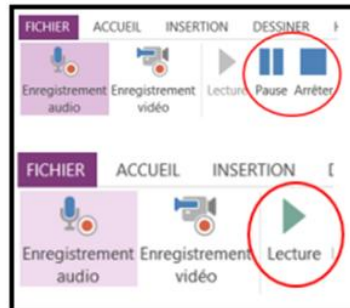
Pour prendre des notes sur Skype, suivez les étapes illustrées dans l'image suivante :

**❖ Enregistrer des notes audio et vidéo :**

Pour enregistrer un audio ou vidéo, cliquez sur :

Pour effectuer uniquement un enregistrement audio, cliquez sur :

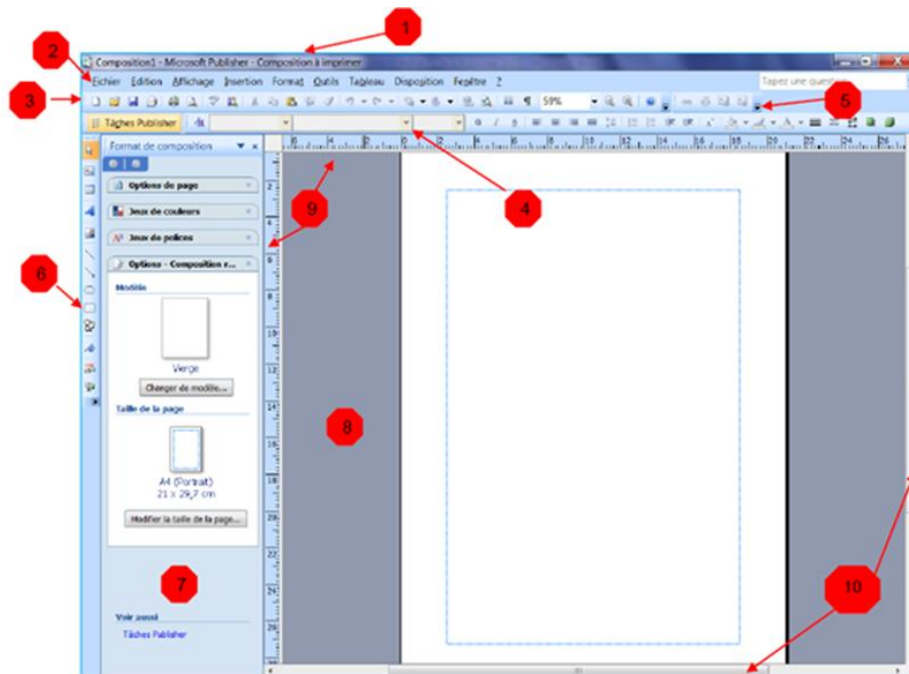
- Enregistrement audio.
- Pause, pour terminer l'enregistrement.



II.8 Microsoft Publisher :



❖ Découverte de l'écran :



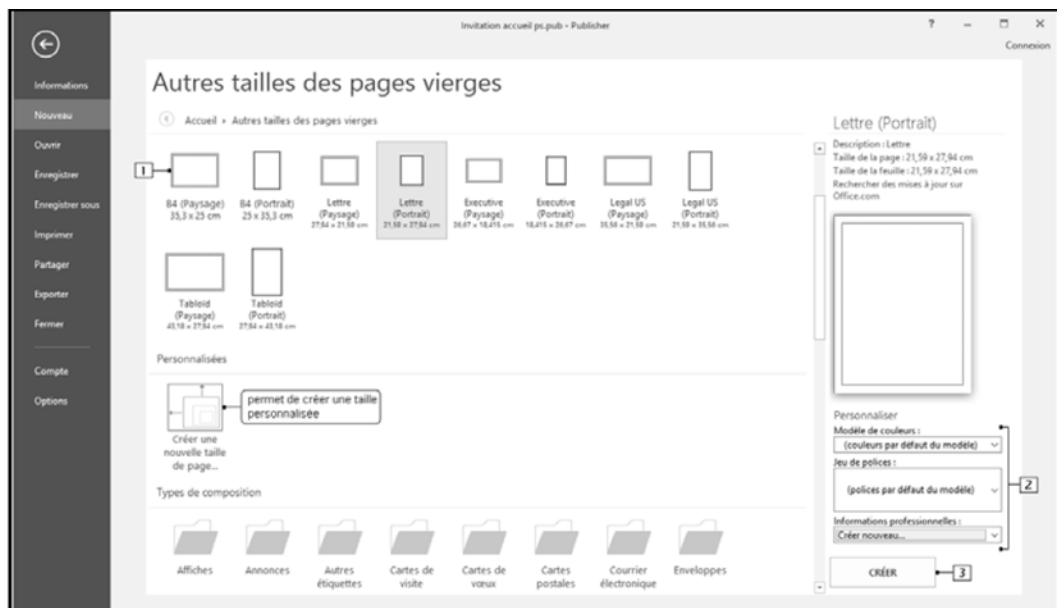
1 : La barre de titre.

2 : La barre de menu.

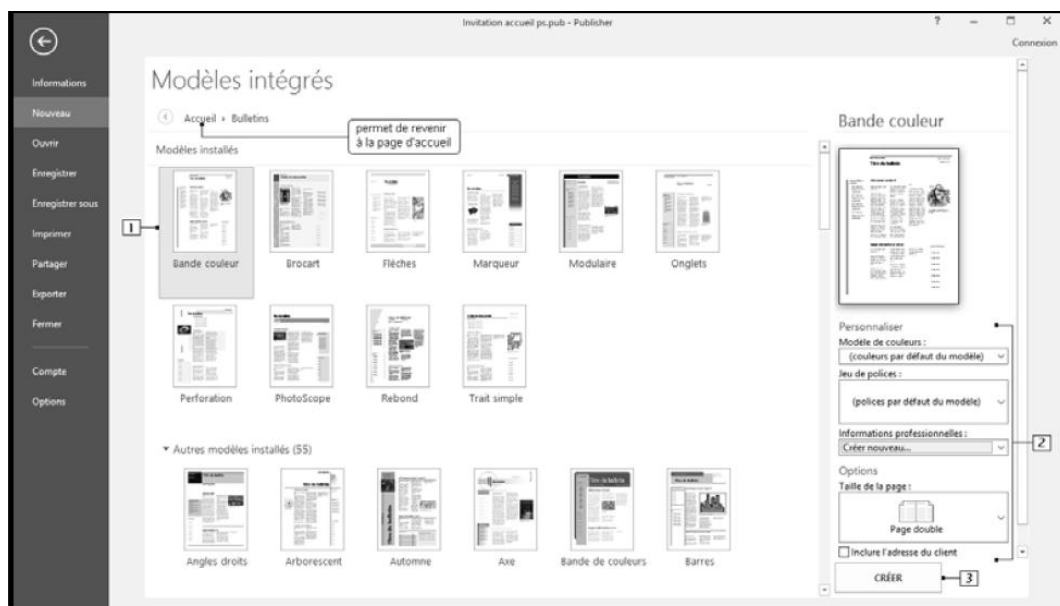
3 : La barre d'outils standard.

- 4 : La barre d'outils mise en forme.
- 5 : La barre d'outils lier les zones.
- 6 : La barre d'outils Objets.
- 7 : Le volet office.
- 8 : Le plan de montage.
- 9 : Les règles.
- 10 : Les barres de défilement.

❖ Pour créer une composition vierge, en cliquant sur "Fichier" ensuite sur "Nouveau".



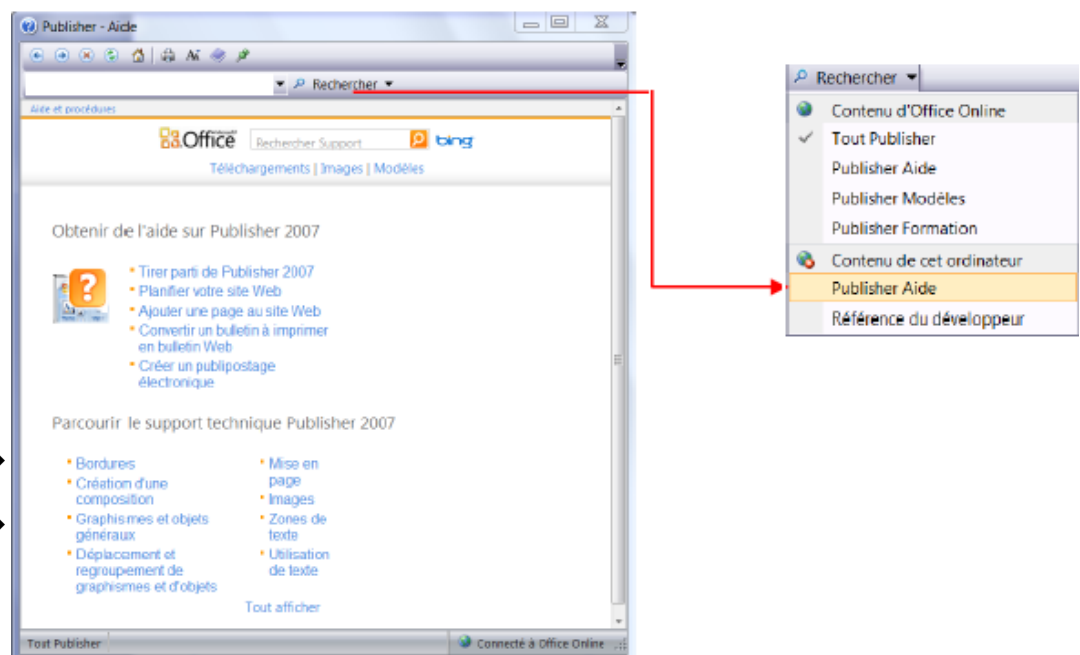
❖ Pour créer la composition à partir d'un modèle, en cliquant sur "Personnel" dans la partie supérieure de la page d'accueil.



- ❖ Pour ouvrir une composition, en cliquant sur “Fichier” ensuite sur “Ouvrir”.



- ❖ Pour effectuer une recherche par un mot clé, en cliquant sur le champ “Rechercher”.



- ❖ Pour effectuer une recherche à partir de la table des matières, en cliquant sur la fenêtre “Publisher Aide” et on clique sur le Bouton “Afficher la table de la matière”.



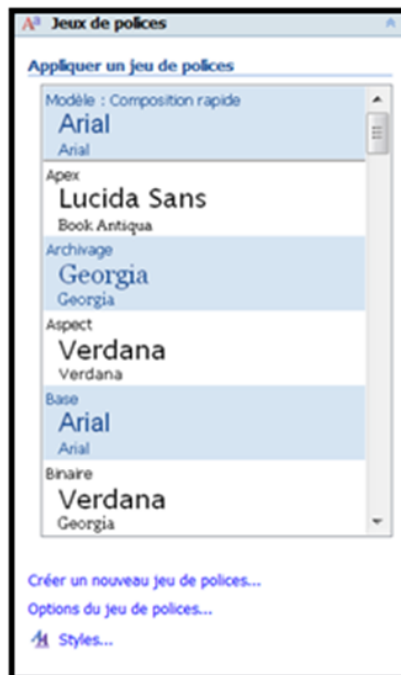
- ❖ Pour définir les propriétés d'une composition, en cliquant sur "Propriétés" puis sur "Résumé".



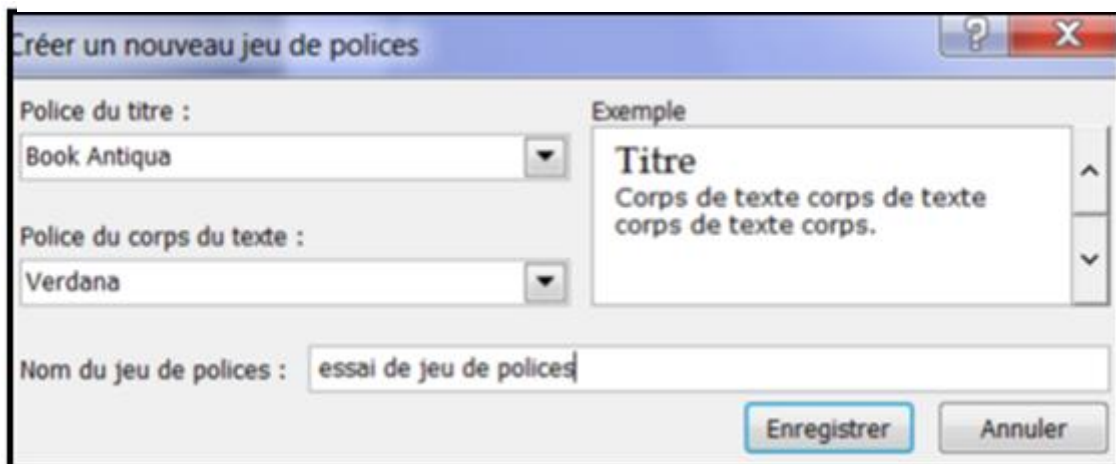
- ❖ Pour adapter un jeu de couleurs, en cliquant sur le menu "Format" puis sur "Jeux de couleurs".



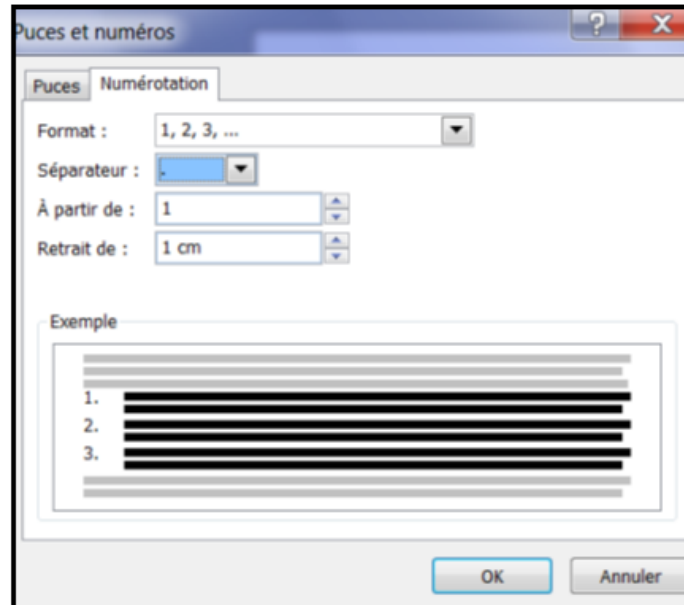
- ❖ Pour appliquer un jeu de police, en cliquant sur ‘‘Jeu de police’’.



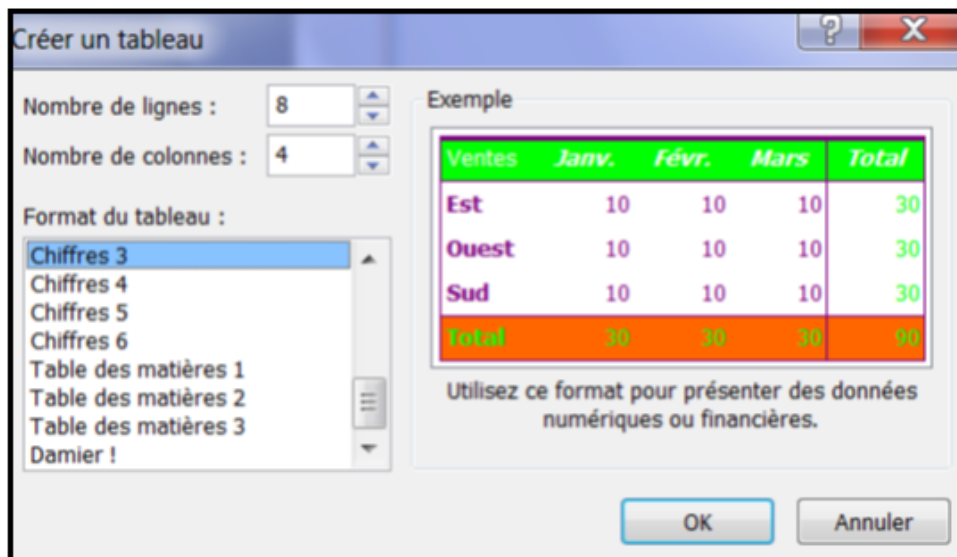
- ❖ Pour créer un jeu de polices, en cliquant sur ‘‘un nouveau jeu de polices’’.



- ❖ Pour créer une liste numérotée, en cliquant sur ‘‘Puce et numéros’’, puis sur ‘‘Numérotation’’.



❖ Pour insérer un tableau, en cliquant sur ‘‘Insérer un Tableau’’.



II.9 Microsoft Outlook :

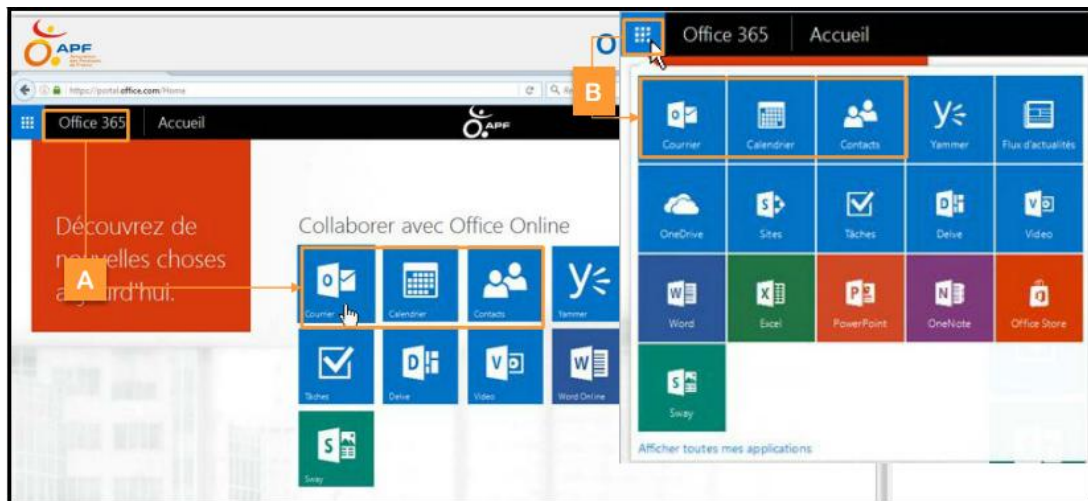


Le Microsoft Outlook est un logiciel informatique de Microsoft bureautique. Il permet de conserver les e-mails, les calendriers, les courriers électroniques et les contacts de façon très simple.

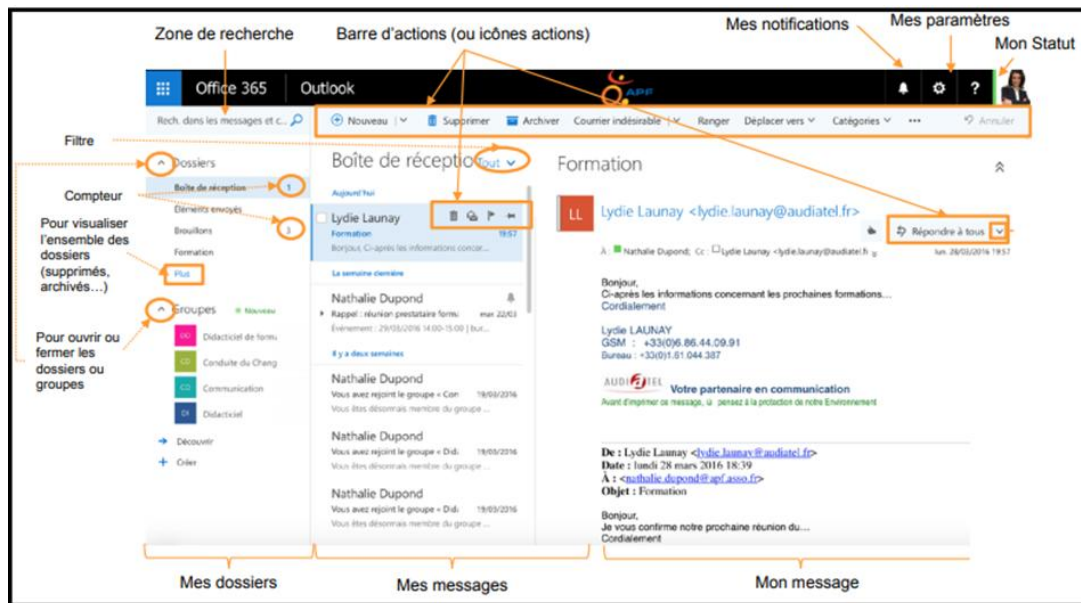
II.9.1 Le rôle de Microsoft Outlook :

- ❖ Découvrir des nouvelles messageries.
- ❖ Capable de gérer Les messages.
- ❖ Personnaliser sa messagerie.

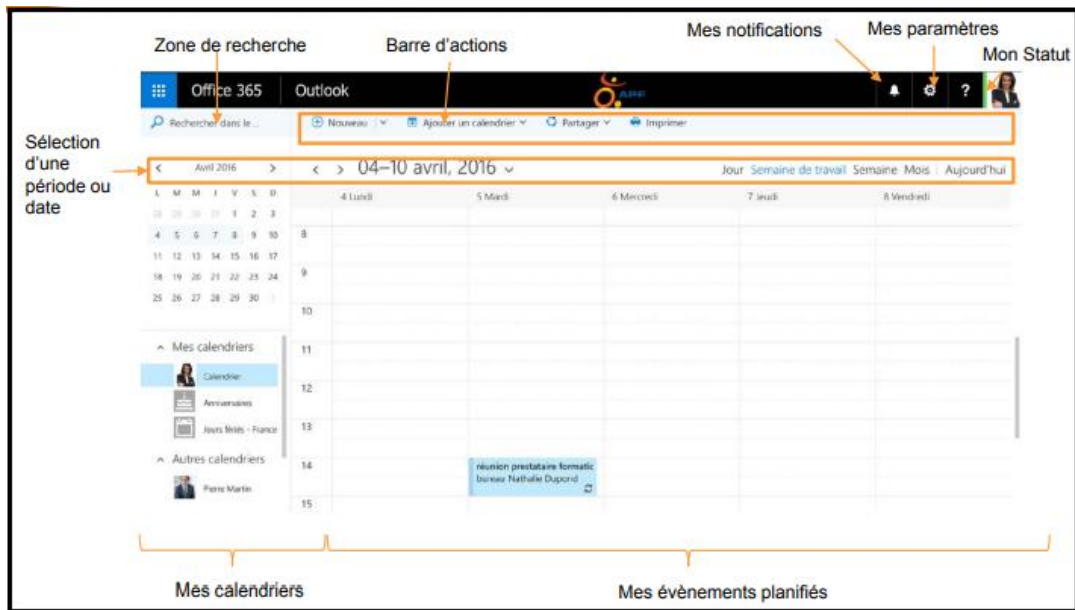
II.9.2 Découverte de l'écran :



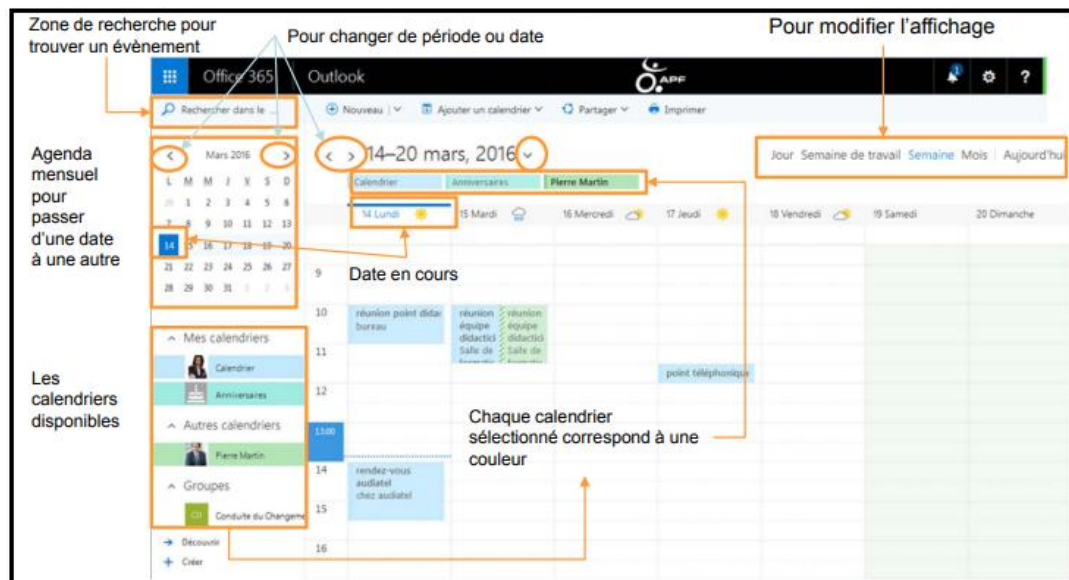
- ❖ **Courrier :**



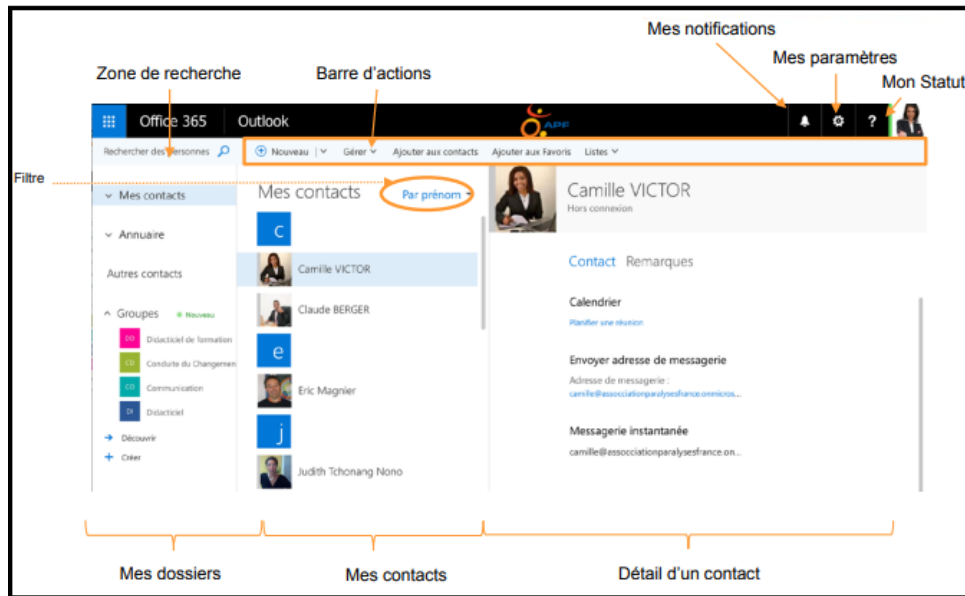
❖ **Calendrier :**



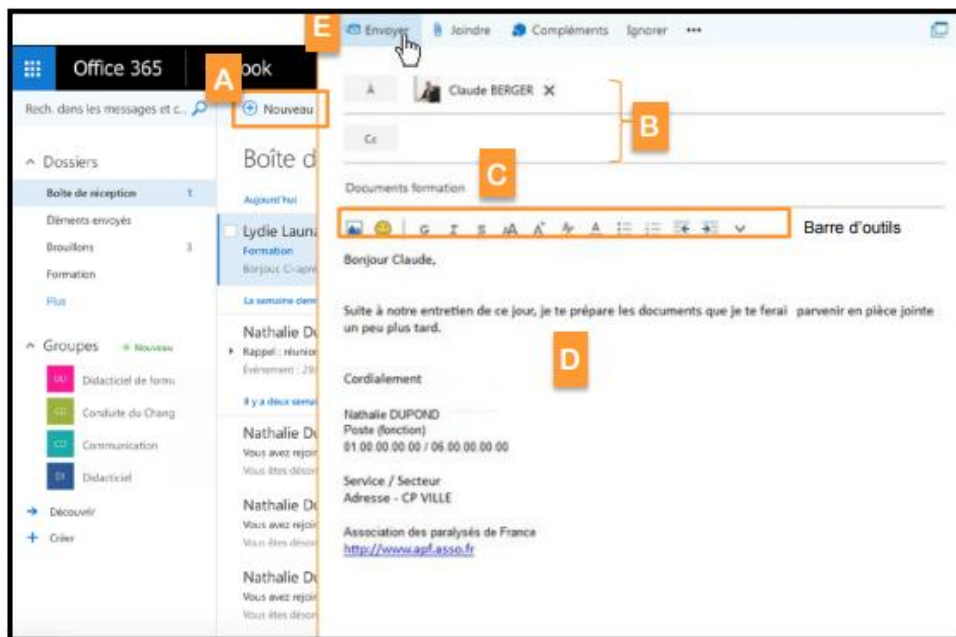
❖ **Vue d'ensemble :** L'image suivante représente les différents types des calendriers.



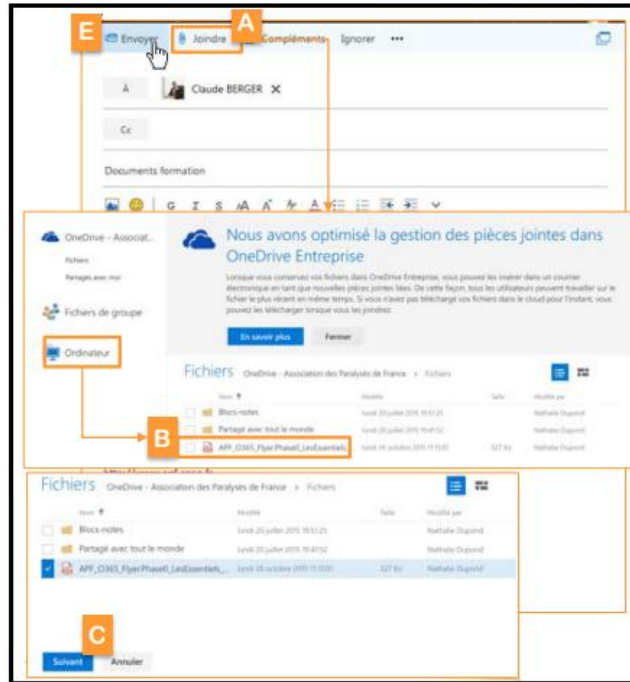
Contacts :



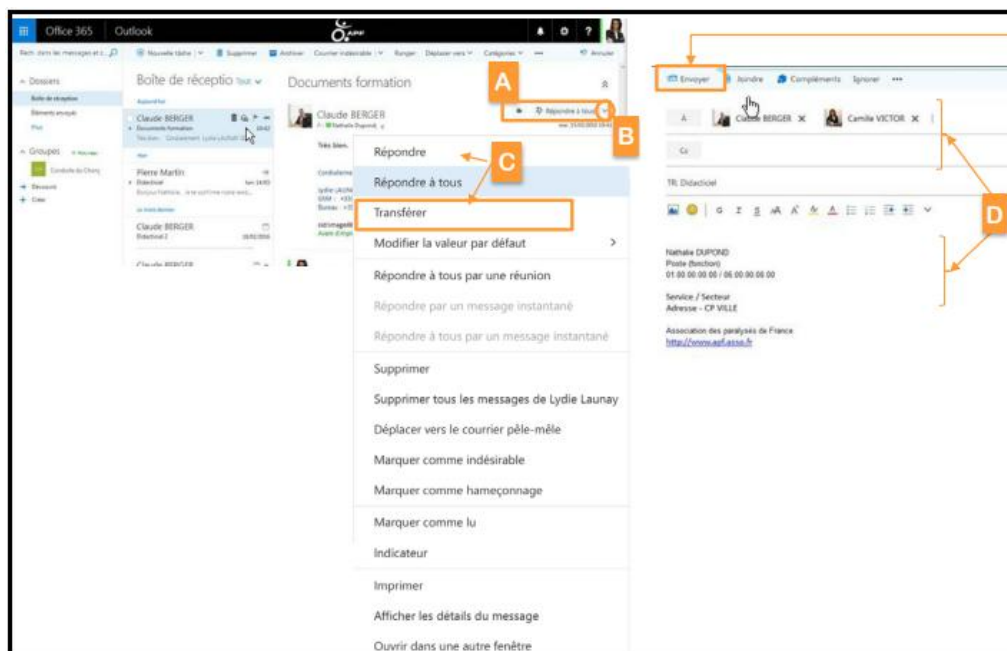
- ❖ Pour envoyer un message, en suivront les étapes A, B, C, D et E.



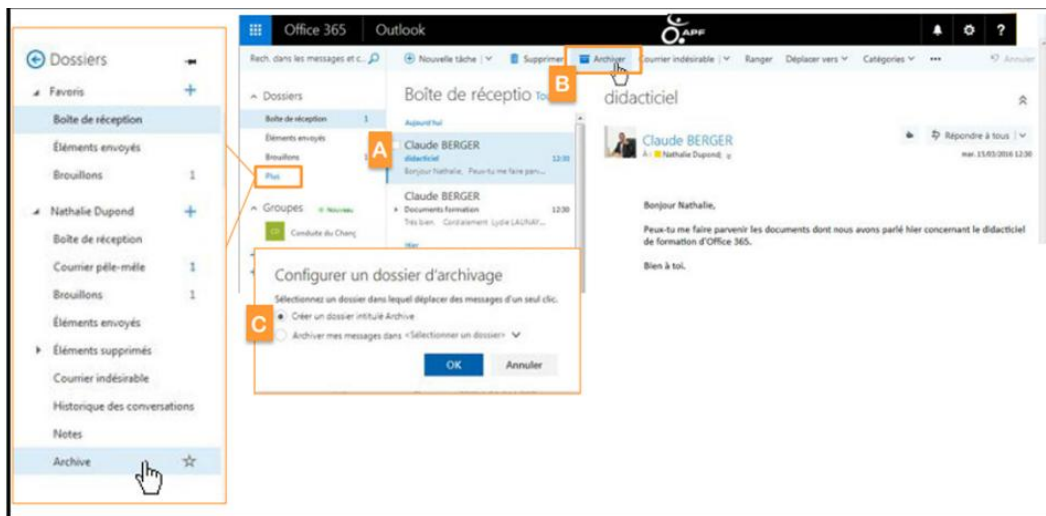
- ❖ Pour insérer un fichier, en cliquant sur ‘‘Joindre’’, puis sélectionner le fichier à partir de l’espace de stockage, ensuite sur ‘‘Suivant’’ et enfin sur ‘‘Envoyer’’.



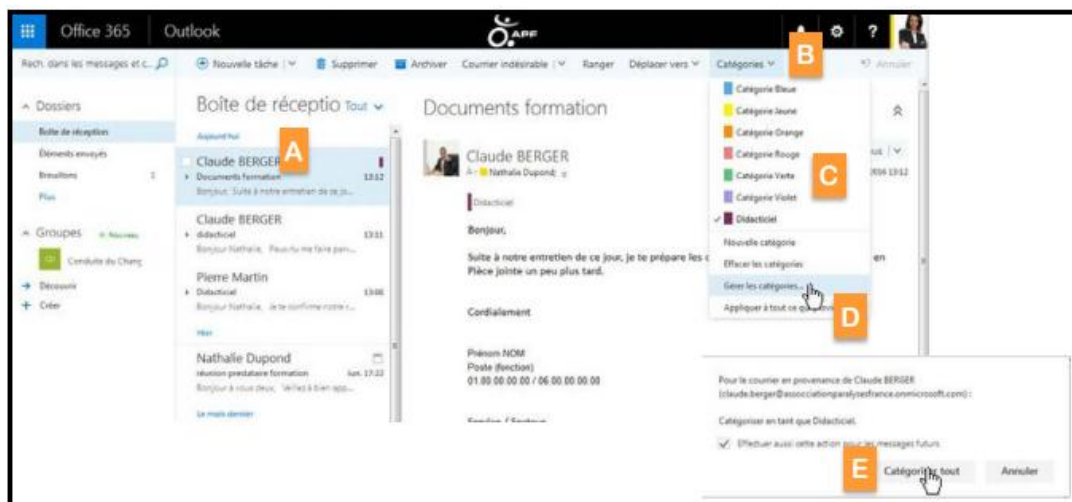
❖ Pour répondre à un message, suivez les étapes A, B, C et D.



- ❖ Pour archiver un message, en cliquant sur "Archiver" :



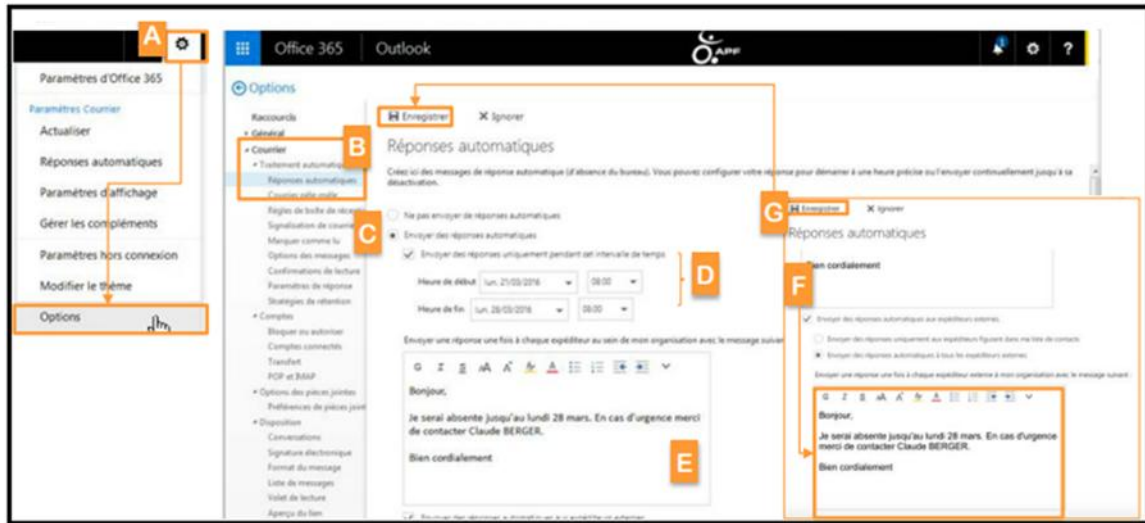
- ❖ Pour crée des catégories de couleurs, suivez les étapes A, B, C, D et E.



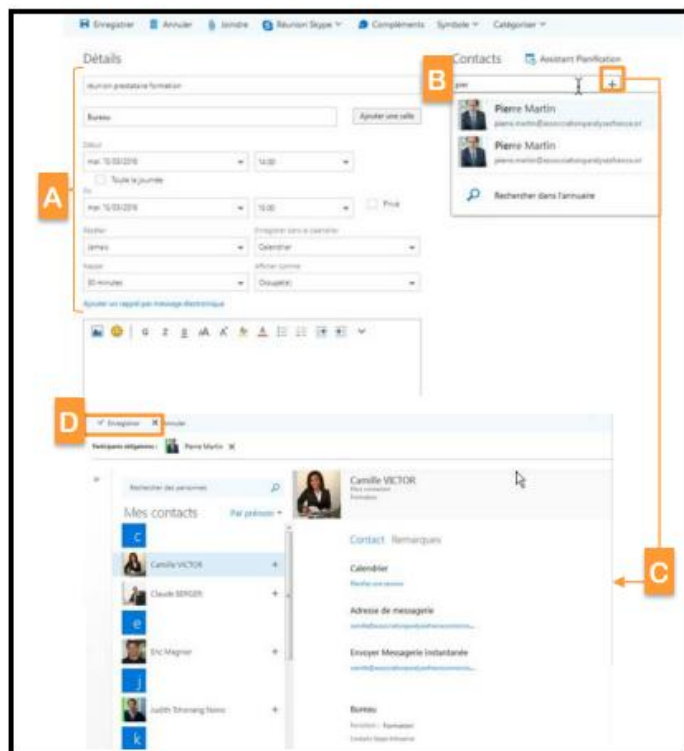
- ❖ Pour créer des règles de classement, en cliquant sur "Ranger", puis "Afficher les règles", puis "Le crayon", puis sur "Ajouter une action".



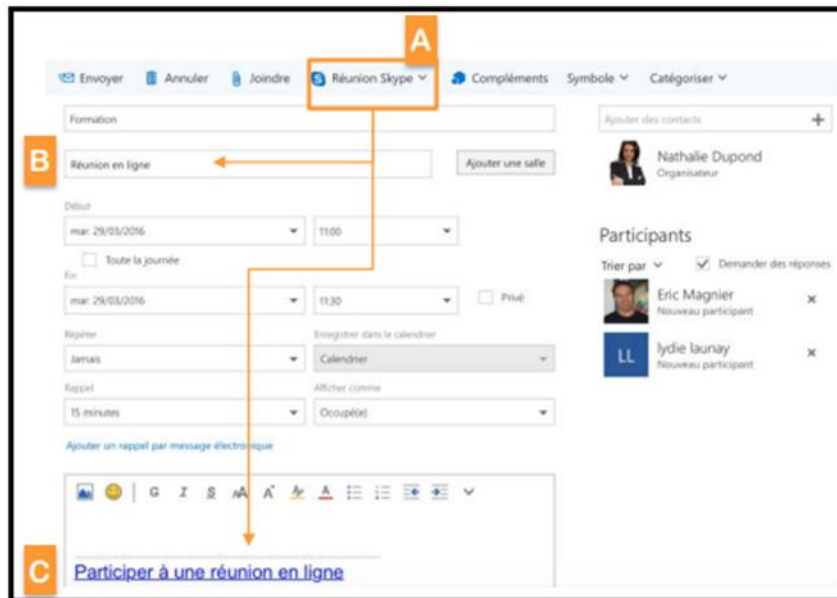
- ❖ Pour définir et activer un message d'absence, suivez les étapes A→G dans l'image ci-dessous.



- ❖ L'image ci-dessous représente les étapes de création d'une réunion :



- ❖ L'image ci-dessous représente les étapes de création d'une réunion en ligne (Skype) :



II.9.3 Les avantages de Microsoft Outlook :

- ❖ Il permet de faire plusieurs communications entre les gens.
- ❖ Il permet de créer des signatures personnalisées.
- ❖ Il permet aussi de consulter plusieurs boîtes de messagerie.

II.9.4 Les inconvénients de Microsoft Outlook :

- ❖ Les comptes messageries ne sont pas autorisés.
- ❖ Risque des virus des ordinateurs.
- ❖ Il est très lent.

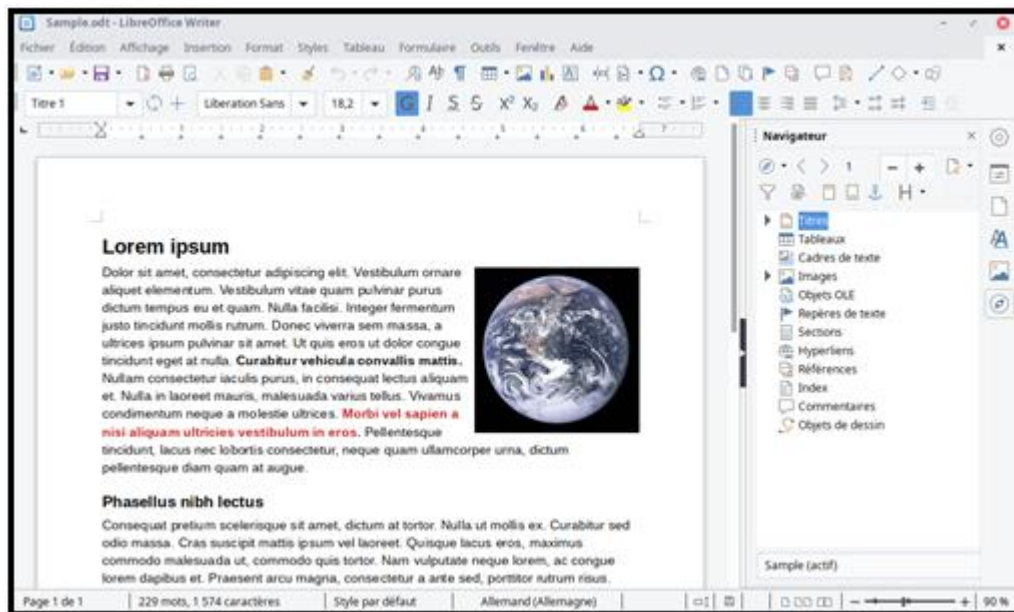
II.10 LibreOffice :



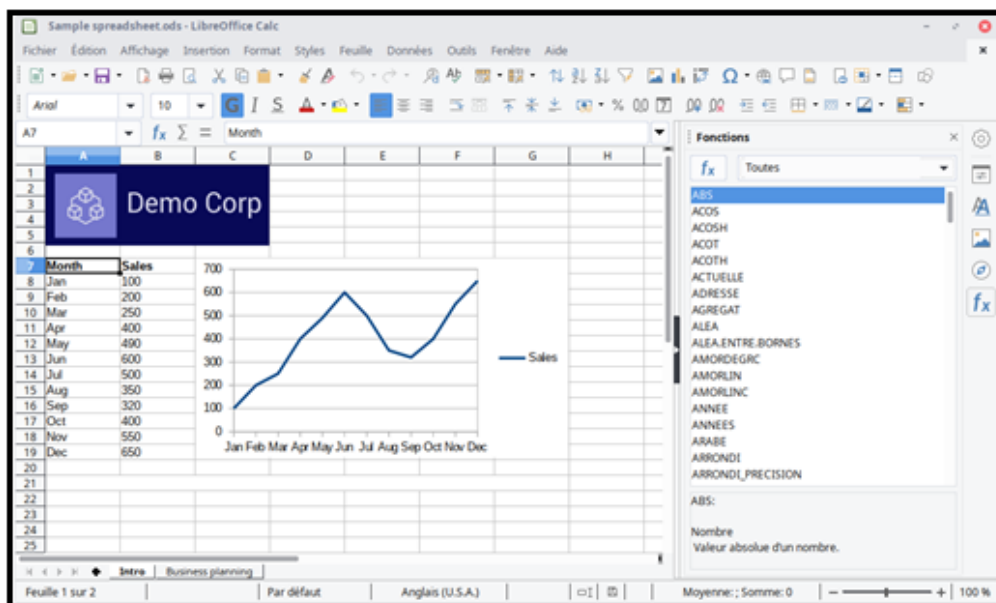
Est un logiciel informatique de Microsoft bureautique libre et gratuit. Il permet de traiter les textes et les tableaux. Il permet de créer automatiquement des graphiques, des dessins, analyser les données...etc.

II.10.1 Découverte de l'écran :

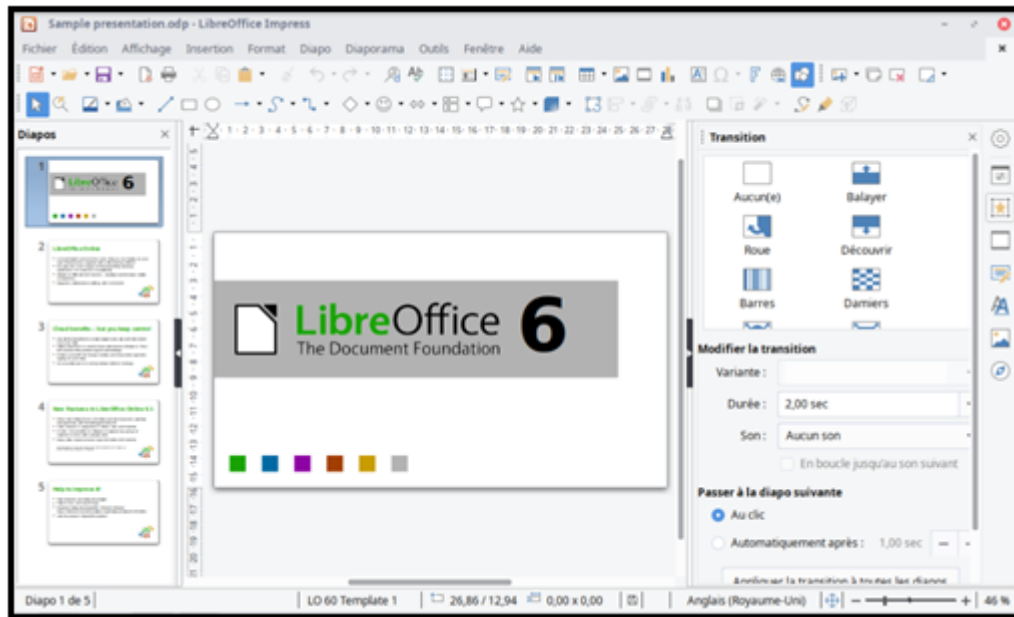
❖ Texte :



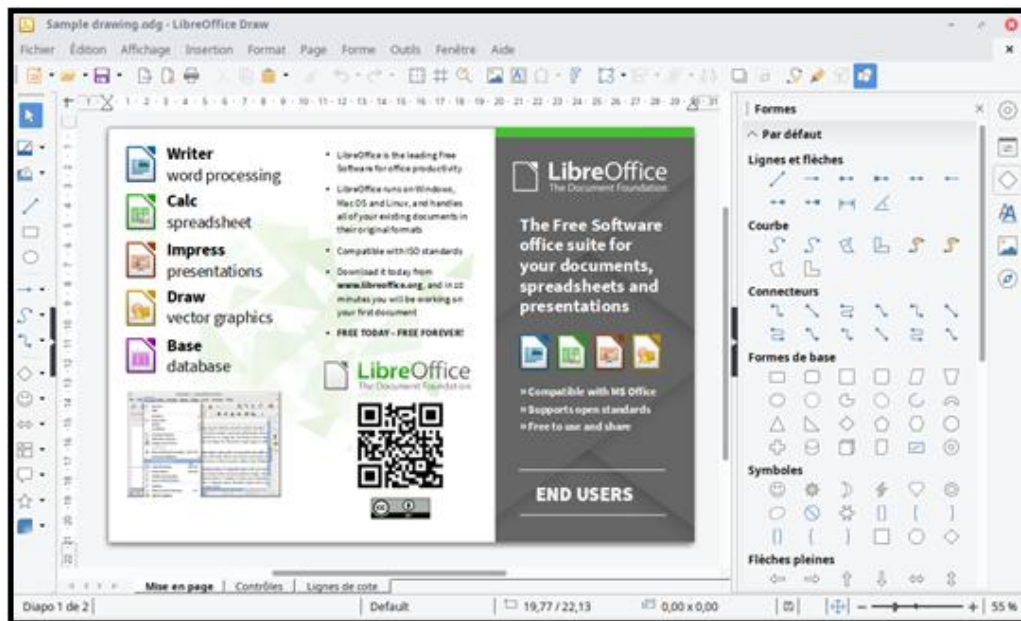
❖ Calc :



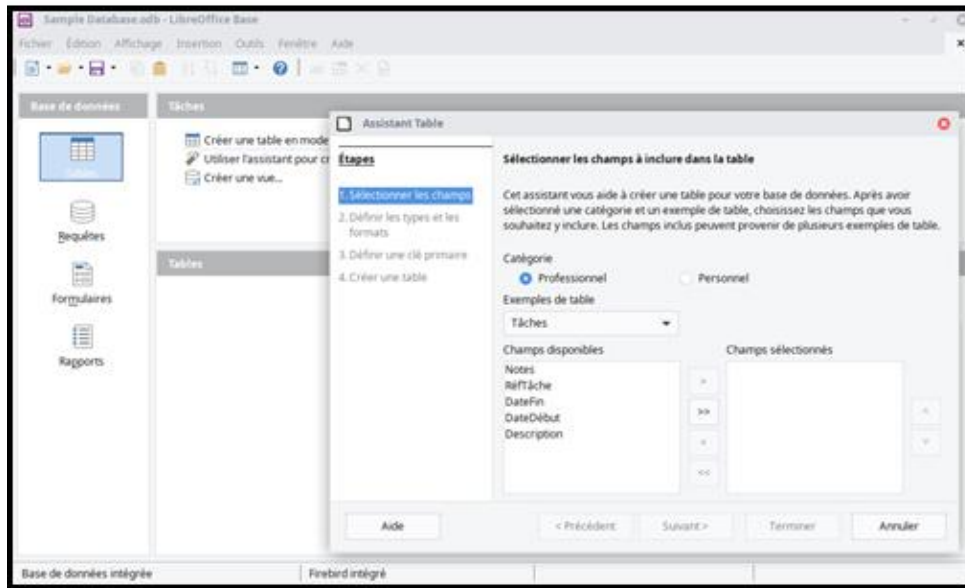
❖ Impress :



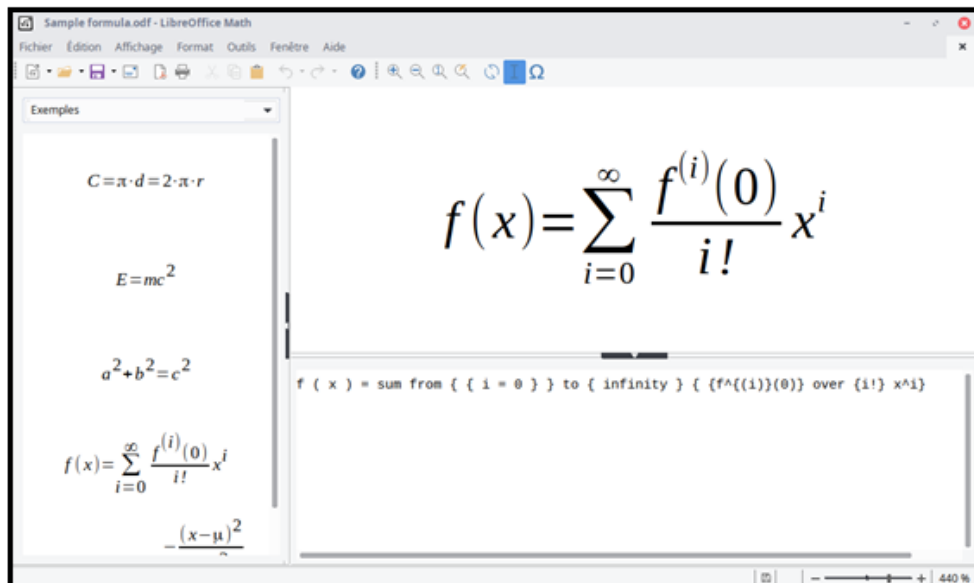
❖ Dessin :



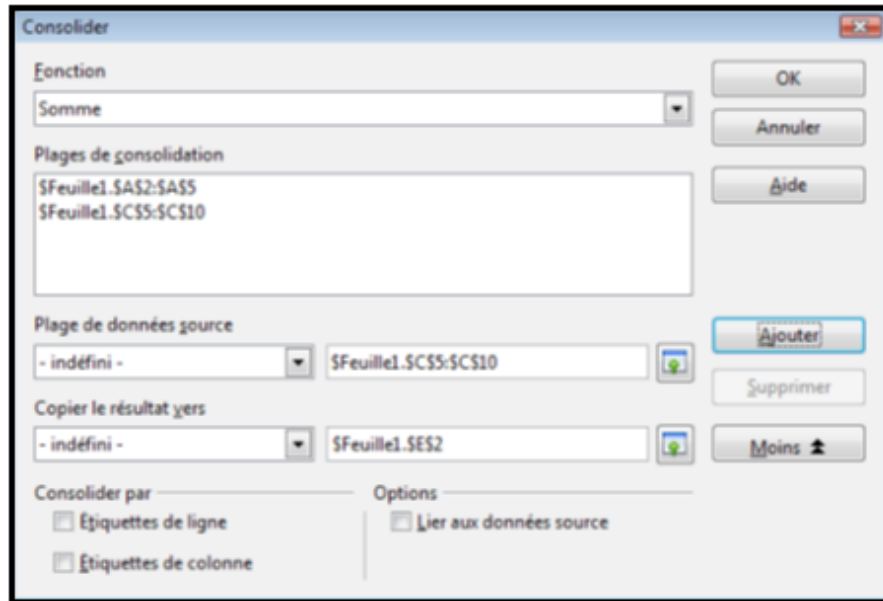
❖ Base :



❖ Formules mathématiques :



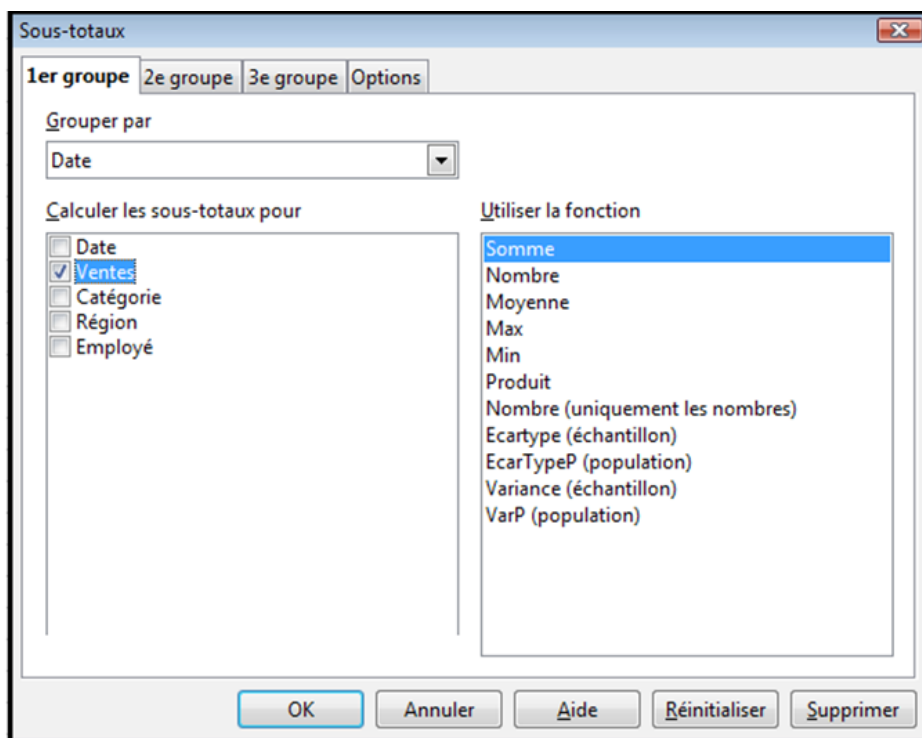
❖ Pour consolider les données, en cliquant sur la commande ‘Données’, puis ‘Consolider’



Exemple : Consolidation des données.

	A	B	C	D	E
1	Champ1				Consolidation
2		1			501
3		2			202
4		3	Champ2		103
5		4	500		604
6			200		300
7			100		400
8			600		
9			300		
10			400		
11					

❖ L'image ci-dessous représente les étapes de création des sous totaux :



Exemple : Résultats des groupes de sous-totaux.

	A	B	C	D	E
1	Date	Ventes	Catégorie	Région	Employé
2	02/01/2012	35,70 €	Equitation	sud	Yves
3		35,70 €	Equitation Somme		
4	02/01/2012	2 422,42 €	Golf	nord	Estelle
5	02/01/2012	1 942,16 €	Golf	est	Didier
6	02/01/2012	93,00 €	Golf	est	Sophie
7		4 457,58 €	Golf Somme		
8	02/01/2012	1 113,88 €	Tennis	ouest	Sophie
9		1 113,88 €	Tennis Somme		
10	02/01/2012 Résultat	5 607,16 €			5
11	03/01/2012	2 004,48 €	Equitation	est	Sophie
12	03/01/2012	128,25 €	Equitation	nord	Eric
13		2 132,73 €	Equitation Somme		
14	03/01/2012	940,51 €	Golf	ouest	Eric
15		940,51 €	Golf Somme		
16	03/01/2012	5 396,85 €	Tennis	ouest	Eric
17	03/01/2012	1 872,00 €	Tennis	ouest	Sophie
18		7 268,85 €	Tennis Somme		
19	03/01/2012 Résultat	10 342,09 €			5
20	04/01/2012	1 707,86 €	Equitation	est	Eric

- ❖ Pour activer la console de présentation, choisissez "Diaporama", puis "Paramètres du diaporama" et puis cliquez sur le menu "Affichage", ensuite "Console de présentation".

<p>Nouveau document</p> <p><input type="checkbox"/> Commencer par la sélection de modèle</p> <p>Paramètres</p> <p><input type="checkbox"/> Copier lors du déplacement</p> <p><input type="checkbox"/> Utiliser le cache d'arrière-plan</p> <p><input type="checkbox"/> Objets toujours déplaçables</p> <p><input type="checkbox"/> Ne pas distordre les objets en courbe</p> <p>Unité de mesure : <input type="text" value=""/></p> <p>Tabulations : <input type="text" value="5,00"/></p> <p>Compatibilité</p> <p><input type="checkbox"/> Ajouter un espace entre les paragraphes et les tableaux</p>	<p>Présentation</p> <p><input type="checkbox"/> Activer le contrôle à distance</p> <p><input type="checkbox"/> Activer la console de présentation</p> <p>Objets de texte</p> <p><input type="checkbox"/> Permettre l'édition rapide</p> <p><input type="checkbox"/> Seule la zone de texte peut être sélectionnée</p> <p>Échelle</p> <p>Échelle de dessin : <input type="text" value=""/></p>
--	--

❖ Contrôles de la console de présentation :



❖ Pour créer un scénario, choisissez la commande "Outils", ensuite "Scénario".

Créer un scénario

Nom du scénario :

Commentaire :

Paramètres

Afficher la bordure

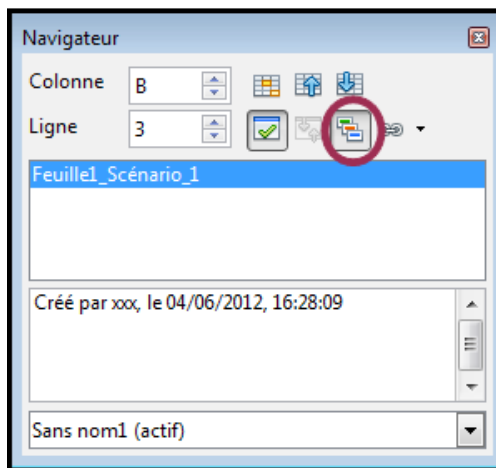
Recopier

Copier la feuille entière

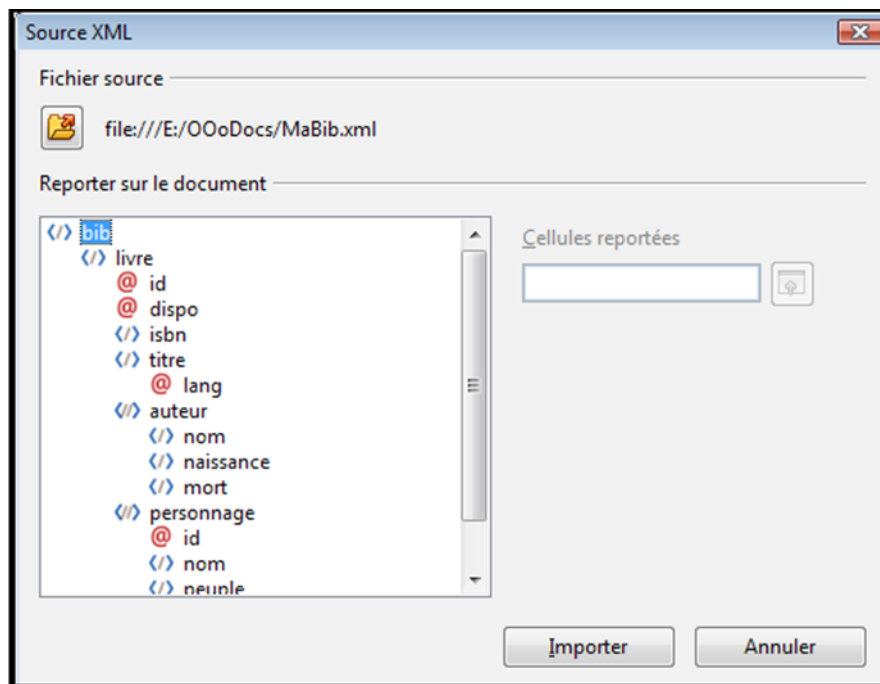
Empêcher les modifications

Buttons: **OK**, **Annuler**, **Aide**

- ❖ Cette image représente comment gérer les scénarios dans le Navigateur :



- ❖ Pour analyser les données d'un fichier source XML, choisissez la commande 'Données', puis 'source XML'.



Applications :

1. Ouvrir le dossier ‘‘Mes documents’’ et créer un dossier avec votre ‘‘Nom et Prénom’’.
2. Créer un dossier appelé ‘‘Chimie informatique’’ dans votre dossier.
3. Créer deux autres dossiers appelés ‘‘Chapitre1’’ et ‘‘Chapitre2’’ dans le dossier ‘‘Chimie informatique’’.
4. Supprimer le dossier ‘‘Chapitre 1’’.
5. Saisir un texte ‘‘ L’objectif de la chimie informatique est de prédire de nouveaux médicaments ‘’ avec les étapes suivantes :
 - Police : Arial
 - Taille : 12.
 - Interligne : 1.5.
 - Retrait première ligne : 1 cm
6. Créez un tableau de 4 colonnes et 8 lignes.
 - 6.1 Appliquez une mise un style prédéfini au tableau.
7. Comment effacer tous les filtres qui sont appliqués dans les colonnes ?
 - Affichage > En-têtes
 - Accueil > Effacer
 - Données > Filtre > Avancé
- 7.1 Comment changer le compte utilisé par Microsoft OneNote?
- 7.2 Quelle est la séquence de commandes pour ouvrir un Notebook existant?
- 7.3 Comment les pages sont-elles organisées dans OneNote?
- 7.4 Si la table que vous souhaitez insérer a des dimensions plus grandes que celles disponibles dans le menu tableau, que devez-vous faire?

7.5 Quelles sont les deux options en ligne possibles lors de l'insertion d'images ?

III. Traitement statistique et graphique de données expérimentales :

III.1 Introduction :

La statistique étudie la modélisation mathématique et traite, analyse et interprète les données expérimentales par des méthodes et des outils informatiques très puissantes.

III.2 Champ d'application :

- ❖ La gestion des systèmes d'information.
- ❖ L'analyse des citations et scientométrie.
- ❖ La prédiction de propriétés physico-chimiques des molécules.
- ❖ La conception de nouveaux médicaments.
- ❖ La résolution des structures moléculaires.

III.3 Concepts et méthodes :

❖ **Traitement d'images :**

- Introduction au traitement d'images.
- Segmentation.

❖ **Bases de données :**

- Introduction aux bases de données.
- Conception d'un schéma de base de données.
- Utilisation.

❖ **Traitement de données :**

- Des statistiques pour des questions scientifiques.
- Environnement R.
- Graphiques - corrélation - tests statistiques.

❖ **Bioanalyse :**

- Aperçu de ressources disponibles.
- Banques de données publiques.

❖ **Serveurs d'analyses :**

- Annotations existantes, recherche de domaines sur une séquence, recherche de séquences similaires.
- Synthèse des connaissances et observations → esprit critique.

❖ **Modélisation :**

- Introduction à la biologie des systèmes et à la modélisation.

-Validation ou remise en question d'une hypothèse/prédiction des propriétés émergentes.

III.4 Démarche et principales étapes dans le domaine de chimie :

- ❖ La résolution de la structure des molécules biologiques (Préparation des structures 2D et 3D) représente une première étape de la connaissance des processus chimiques.
- ❖ Étudier la complexité théorique du problème.
- ❖ Développer des algorithmes et les programmes permettant de le résoudre.
- ❖ Pré-optimisation et optimisation des structures 3D.
- ❖ Traitements des résultats obtenus.

III.5 Problématiques :

De nombreuses difficultés pour les computationnels chimistes tels que :

- ❖ La résolution des problèmes des interactions inter et intra-moléculaires.
- ❖ La prédire des structures moléculaires et la détermination de l'activité biologique et les différentes propriétés physico-chimiques des composés, tel que l'enthalpie des liaisons, les énergies des différentes conformères..etc).
- ❖ Très difficile de définir avec exactitude un modèle adéquat d'évolution des systèmes chimiques.
- ❖ L'utilisation des algorithmes peut être complexe.

III.6 Traitement statistique des données expérimentales :

III.6.1 Définition :

La statistique c'est l'activité qui permette de traiter, d'interpréter et d'analyser les données expérimentales.

III.6.2 La simulation :

La simulation consiste à utiliser le système secondaire pour générer de nouvelles valeurs.

III.6.3 Le développement d'un modèle :

- ❖ Les modèles Euréliens : Qui traitent du cas de la coupe continue en régime stationnaire comme ceux d'IWATA, de CARROLL et STRENKOWSKI...etc.
- ❖ Les modèles Lagrangiens : Qui simulent la formation du copeau comme ceux de CARROLL et STRENKOWSKI, de YANG et OBIKAWA.

- ❖ **Les modèles Comportementaux** : Qui intègrent le comportement du matériau lors de la pénétration de l'outil ainsi que la formation du copeau comme ceux de MARUSICH et ORTIZ, de MADHAVAN et CHANDRASEKAR...etc.

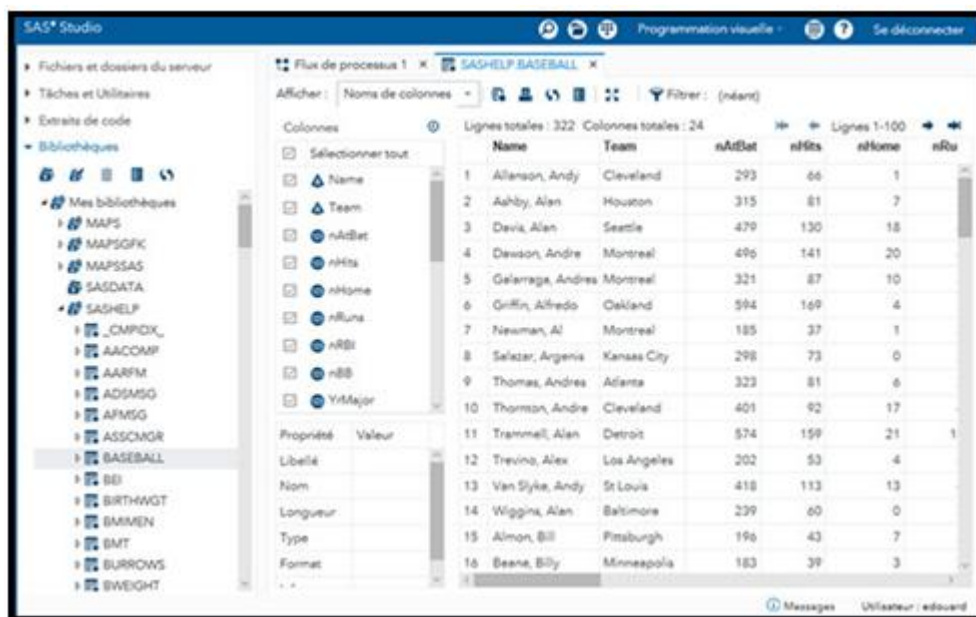
III.7 Les outils informatiques de traitement statistique :

L'outil informatique est un moyen utilisé dans l'analyse statistique des données expérimentales, c'est un moyen performant de calcul qui nous permet des calculs très lents et parfois impossible.

L'alliance entre le moyen informatique avec les techniques statistique a beaucoup aidé dans le développement de l'usinage surtout en termes de création de modèles mathématiques et l'optimisation des paramètres de coupes.

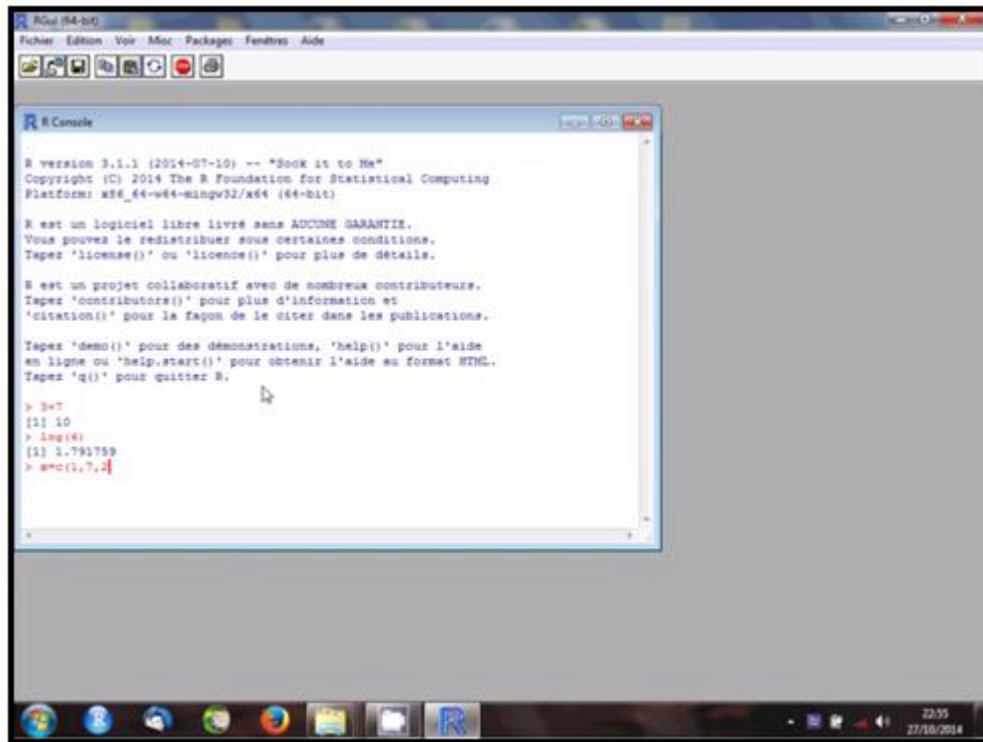
Des logiciels statistiques performants sont à la disponibilité des acteurs de la recherche scientifique que l'on va citer quelque uns ci-dessous tel que :

III.7.1 Le logiciel SAS :



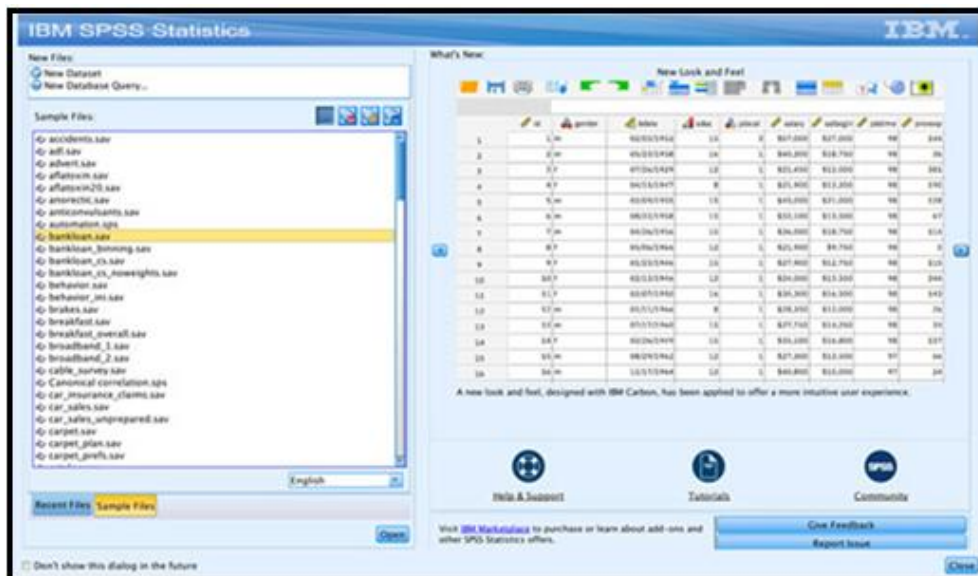
III.7.2 Le logiciel R :

R est un logiciel statistique qui permet de manipuler et stocker les données.



III.7.3 SPSS :

Ce logiciel est largement utilisé.



III.7.4 SPAD :

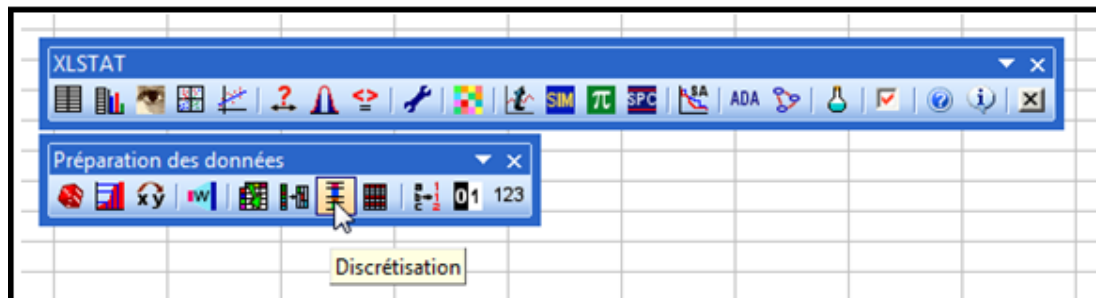
Ce logiciel est permet d'analyse des données expérimentales.

```

----- SPAD.N - MODIFICATION DE PARAMETRES -----
LISTAGE DES PARAMETRES DE COMMANDE
-----
+---+1---+2---+3---+4---+5---+6---+7---+8
1 LISTP=OUI, LISTF=NON, LERFA=OUI : Paramètres généraux
2 NDCZ="SPADEX.LAD" : Fichier des libellés
3 NDONZ="SPADEX.DAD" : Fichier des données
4
5 NDICA="SPADEX.LAR"
6 PROC ARDIC : Lecture des libellés
7 Archivage des libellés
8 LDICZ=EXT, LTYPE=LARGE, LEDIT=COURT, NQEXA=5, NXMOD=0
9
10 NDONA="SPADEX.DAR"
11 PROC ARDON : Lecture des données
12 Archivage des données
13 NIDI=1, NQEXA=5, NIEXA=12>
14 LDONZ=EXT, NEDIT=NON, LEXTR=OUI>
15 TEST=999999.00, NLPOR=-1, NCOLZ=80
16
TAB.LST Lecture (^E:Ecriture.) 100% <F1>: Aide <ALT X>: Fin
    
```

III.7.5 XLSTAT :

Ce logiciel est utilisé dans statistique descriptive et différentielles, dans la simulation et la régression et dans l'analyse des données expérimentales.

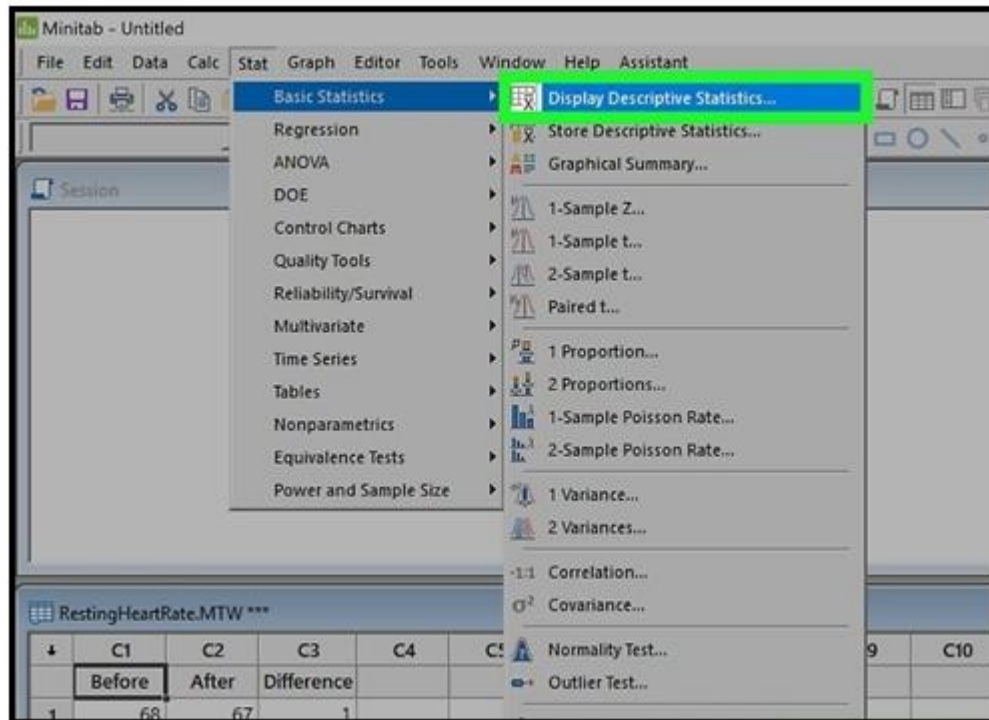


III.7.6 STATGRAPHICS :

	BLOCK	temperature degrees C	flow rate liters/min	concentration %	agitation rpm	catalyst %	yield grams	strength psi
1	1	150.0	10.0	0.0	125.0	1.0		
2	1	150.0	12.0	5.0	150.0	1.5		
3	1	180.0	12.0	0.0	125.0	1.0		
4	1	180.0	10.0	5.0	150.0	1.5		
5	1	150.0	12.0	0.0	125.0	1.5		
6	1	180.0	12.0	5.0	150.0	1.0		
7	1	165.0	11.0	6.5	137.5	1.25		
8	1	150.0	10.0	5.0	150.0	1.0		
9	1	165.0	11.0	6.5	137.5	1.25		
10	1	180.0	10.0	0.0	125.0	1.5		
11	2	150.0	12.0	0.0	150.0	1.0		
12	2	180.0	12.0	5.0	125.0	1.5		
13	2	150.0	10.0	5.0	125.0	1.5		
14	2	150.0	12.0	5.0	125.0	1.0		
15	2	165.0	11.0	6.5	137.5	1.25		
16	2	180.0	12.0	0.0	150.0	1.5		
17	2	180.0	10.0	5.0	125.0	1.0		
18	2	180.0	10.0	0.0	150.0	1.0		
19	2	165.0	11.0	6.5	137.5	1.25		
20	2	150.0	10.0	0.0	150.0	1.5		

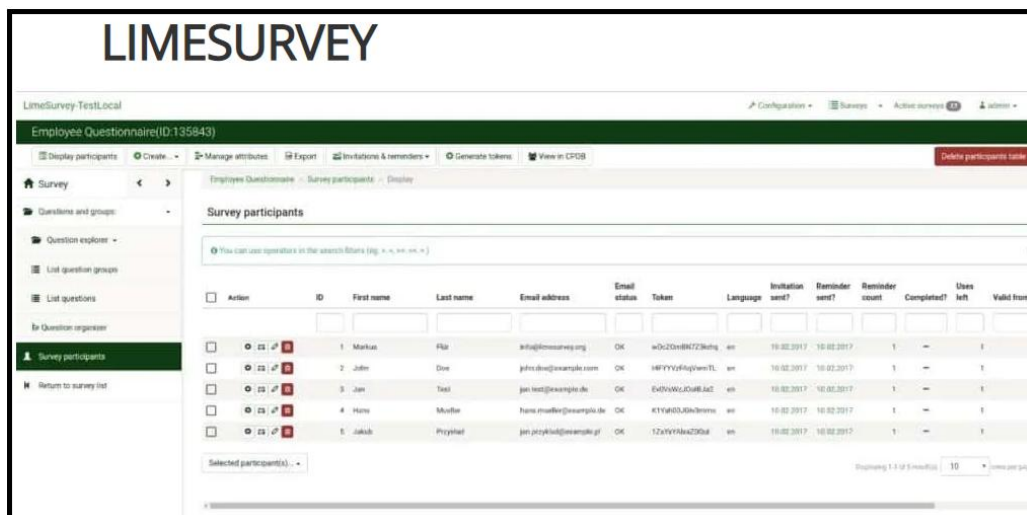
III.7.7 MINI-TAB :

Est un logiciel de statistique qui permet de l'analyse statistique des données expérimentales. Il est utilisé largement dans l'analyse des variances.

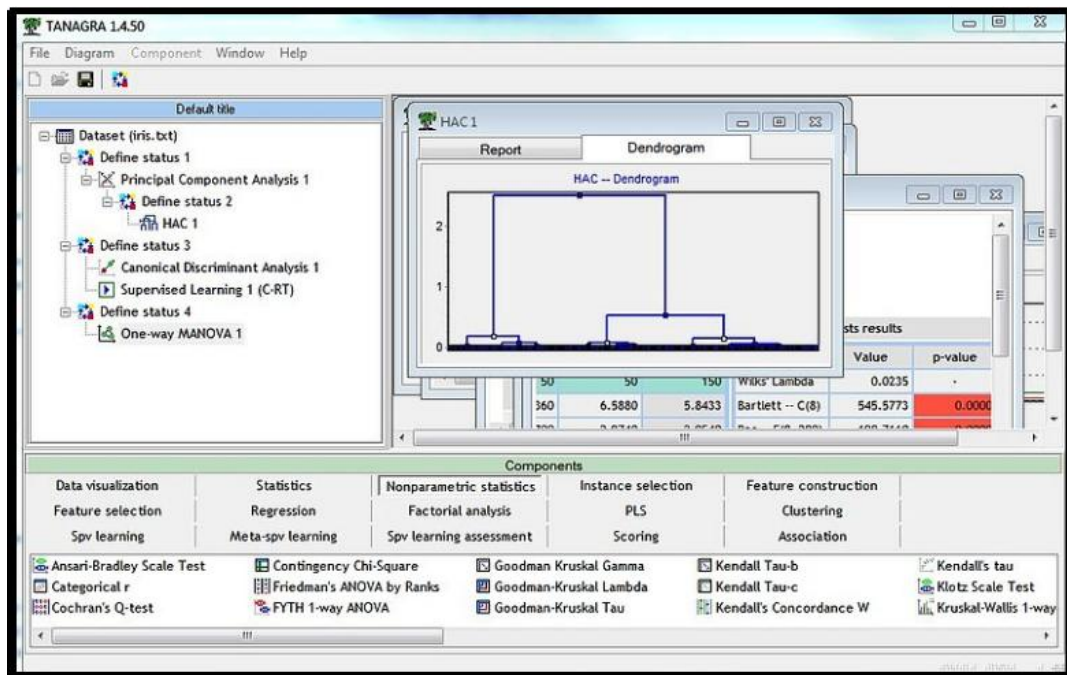


III.7.8 Autres logicielles :

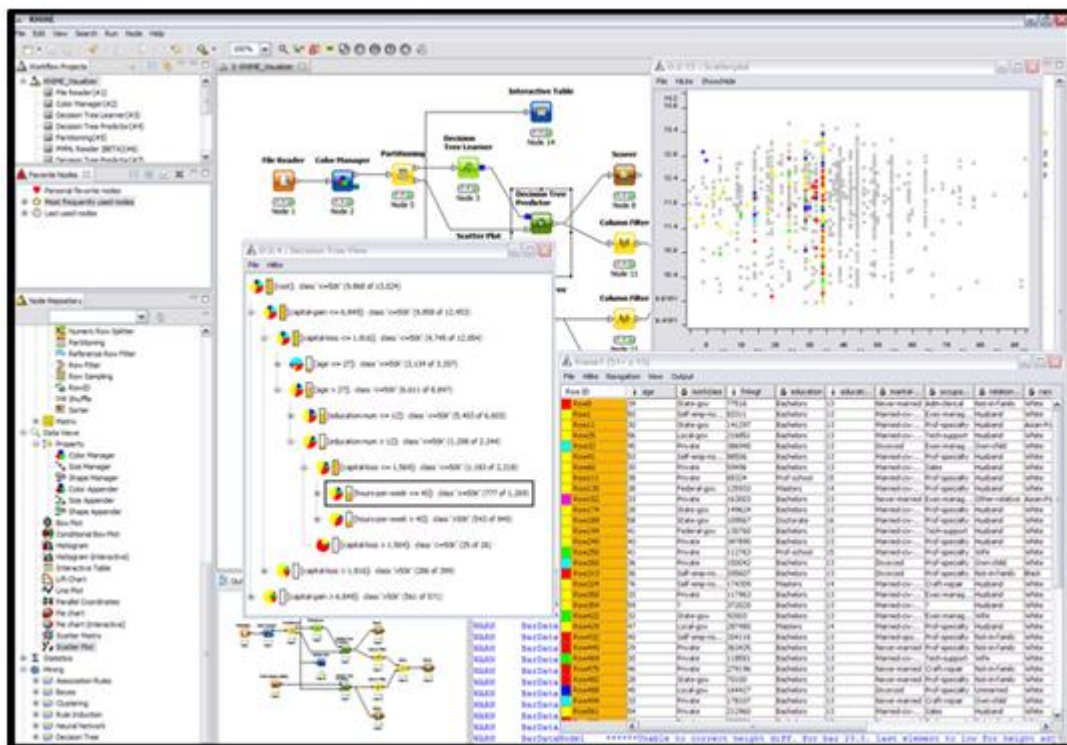
- ❖ Sphinx Arcgis.
- ❖ Lime survey :



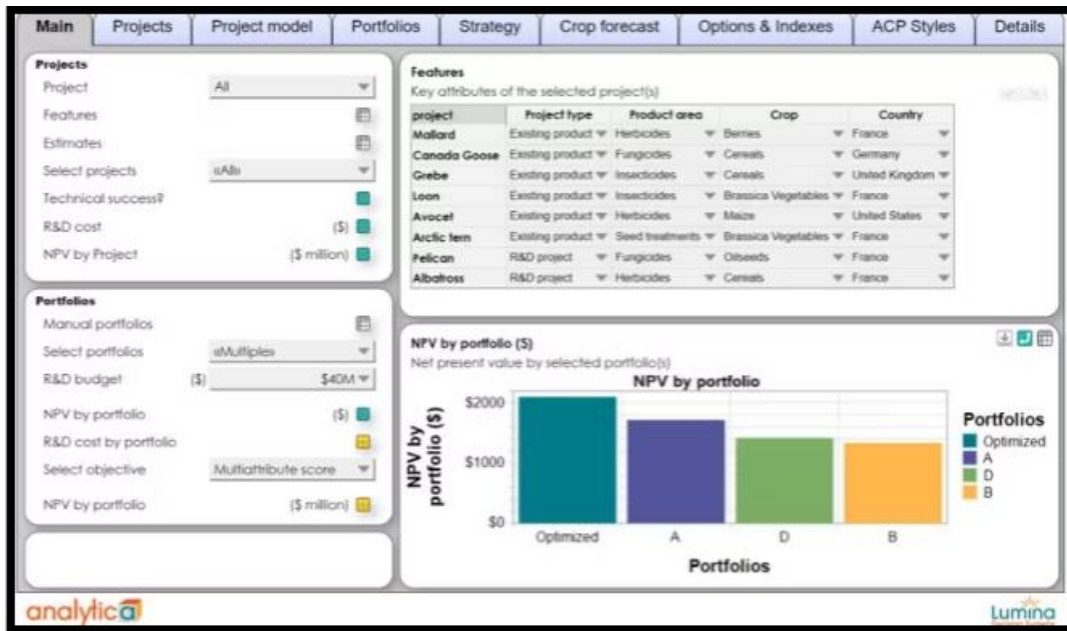
❖ Tanagra :



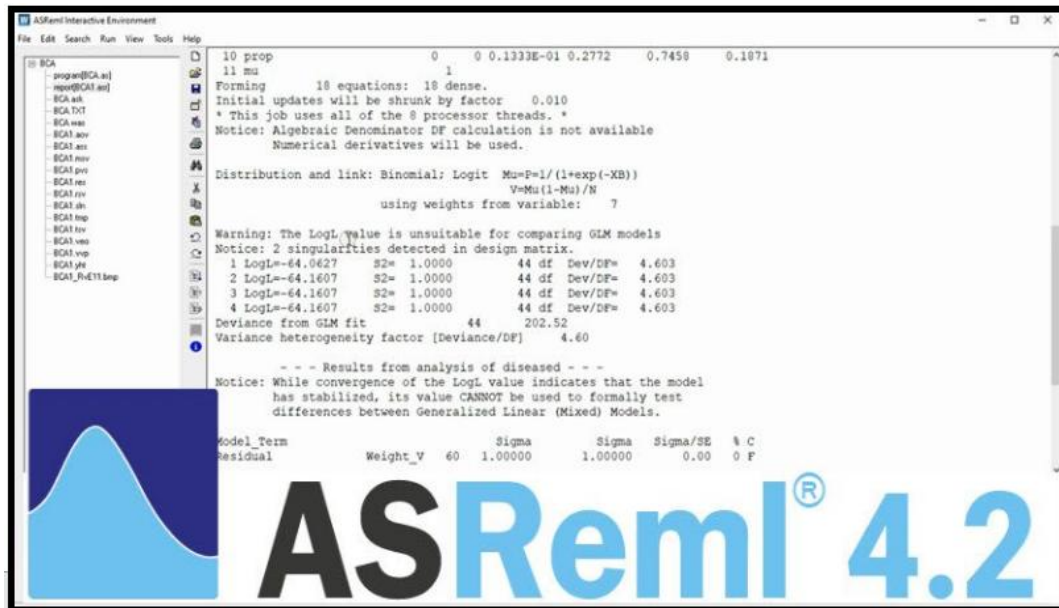
❖ Knime :



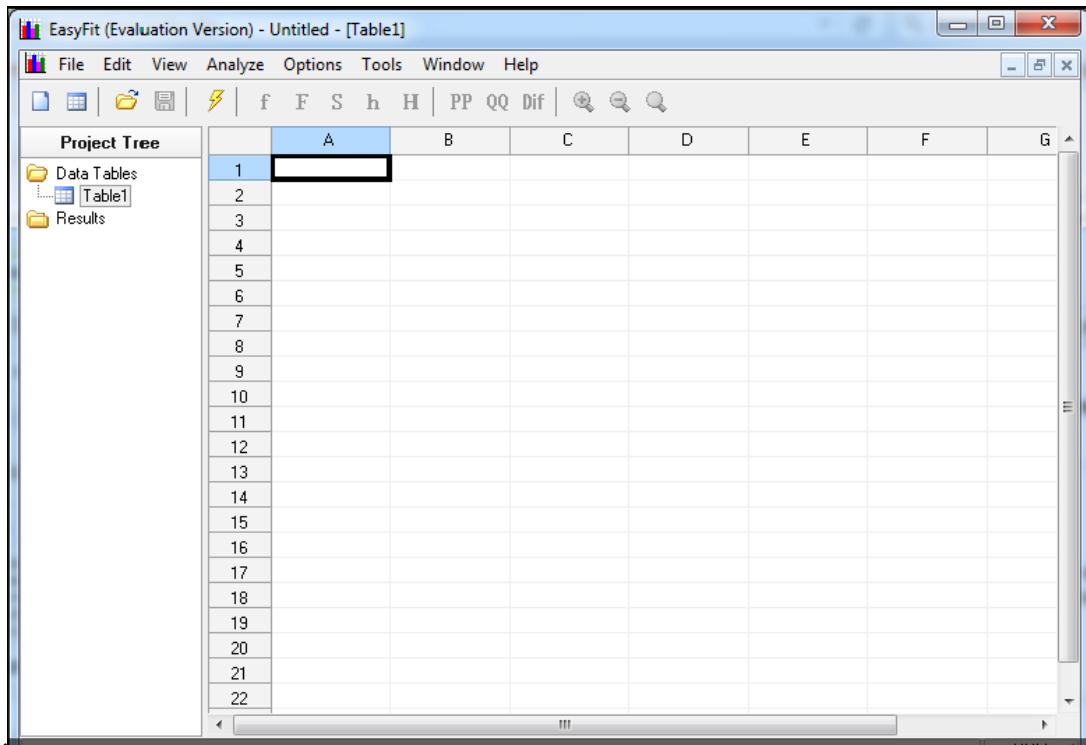
❖ Analytica :



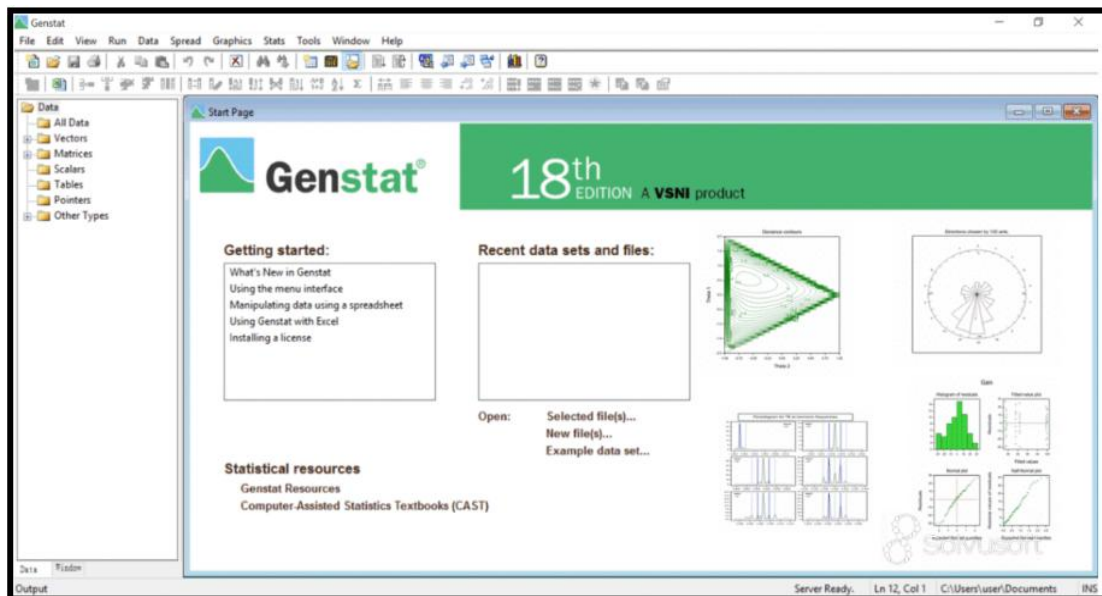
❖ Asremi :



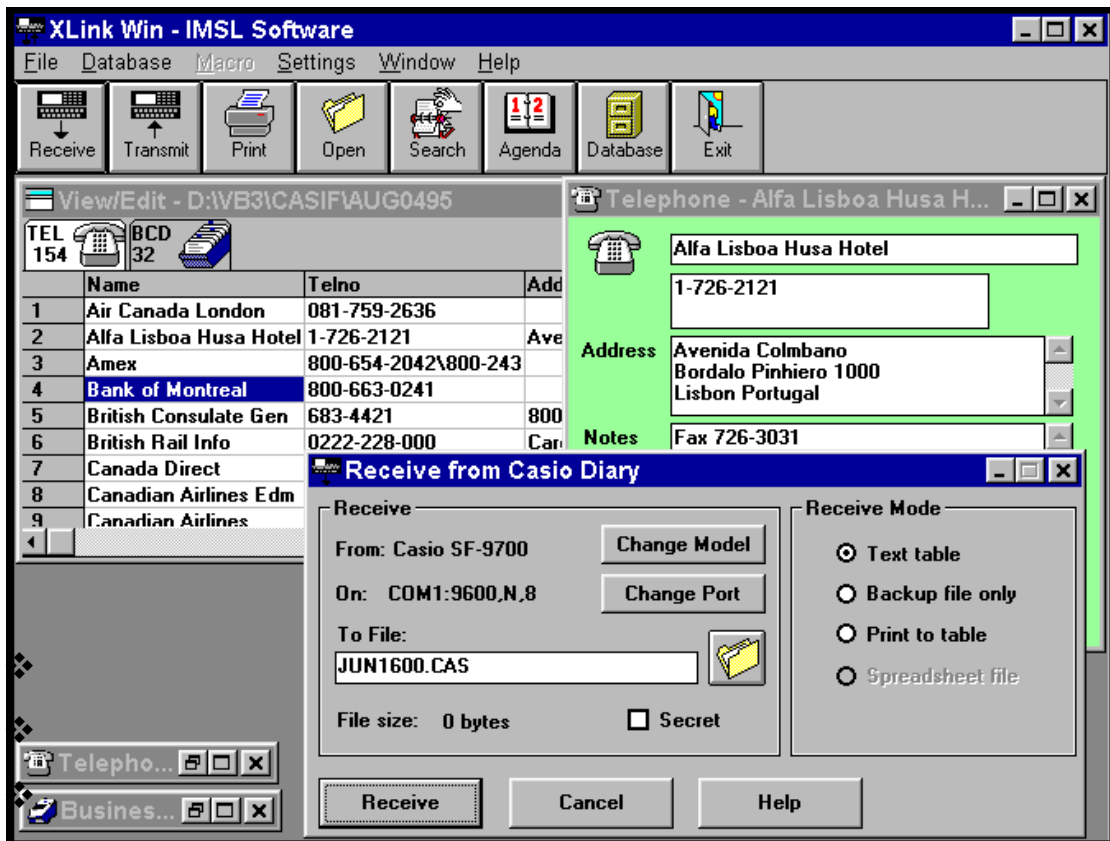
❖ Easy fit :



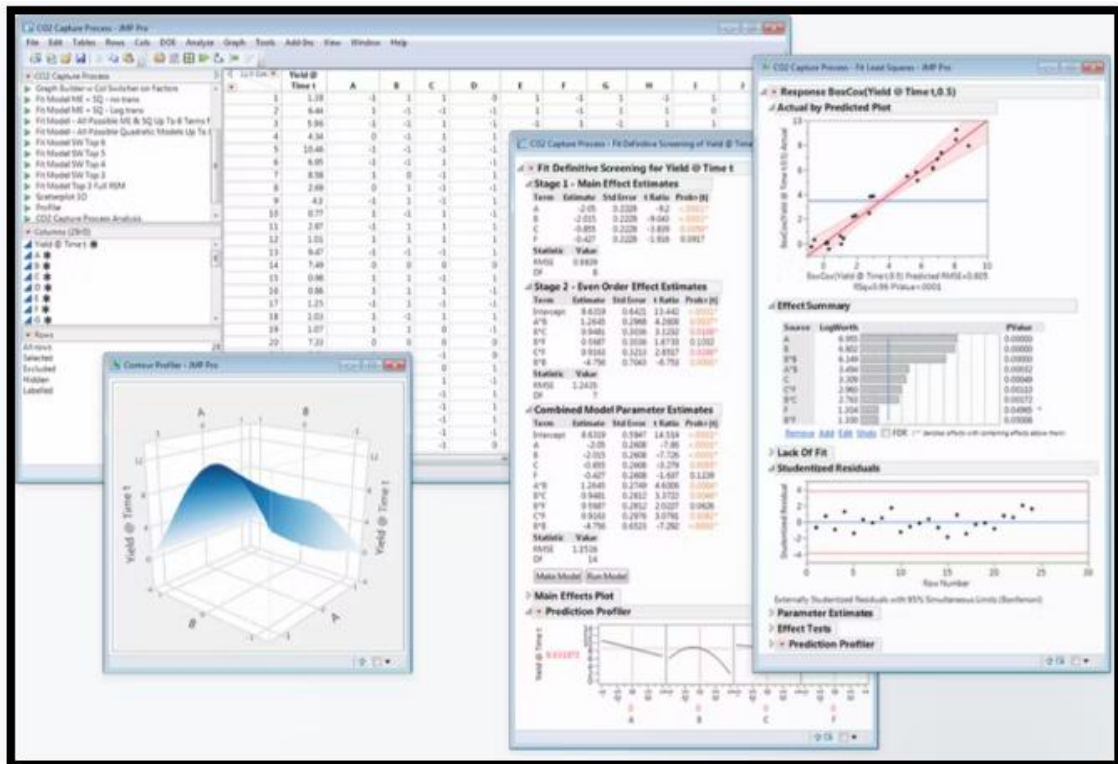
❖ Gentstat :



❖ IMSL :



❖ Jmp :



III.8 L'objectif de traitement graphique des données :

L'objectif cherché est la description globale de la population, repérage des unités statistiques, ou comparaison à un modèle.

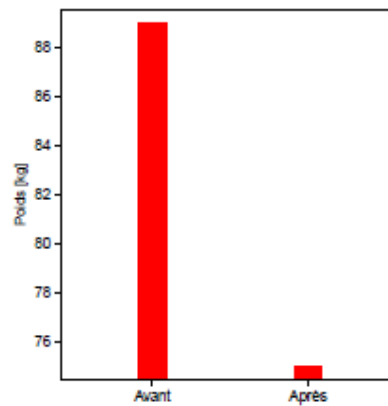
III.8.1 Les graphes :

- ❖ Graphes simples.
- ❖ Un graphe orienté.
- ❖ Graphes étiquetés.

III.8.2 Les différents types de graphes :

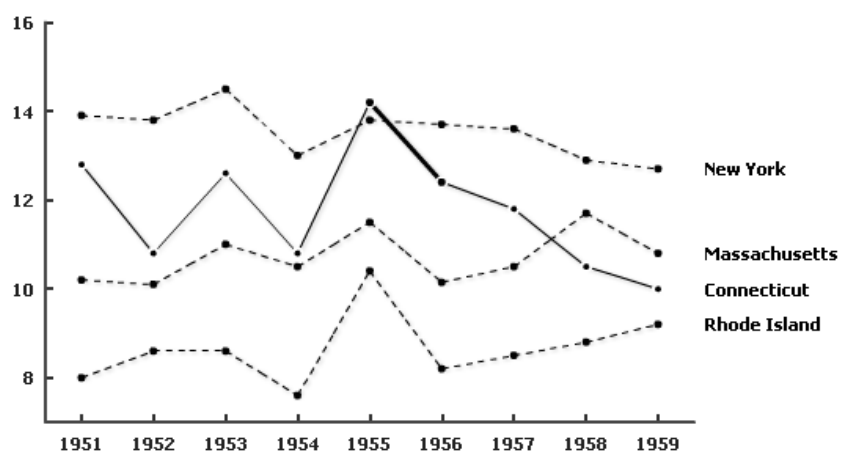
III.8.2.1 Diagramme à bande :

Exemple :



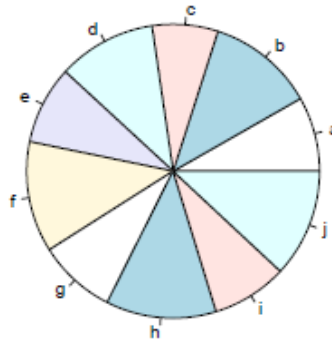
III.8.2.2 Contexte :

Exemple :



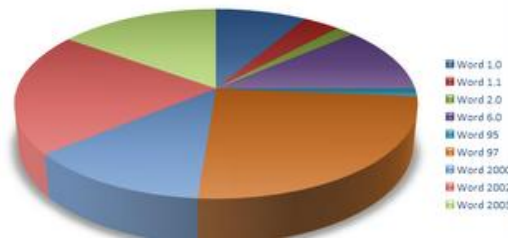
III.8.2.3 Angles et mesures :

Exemple :



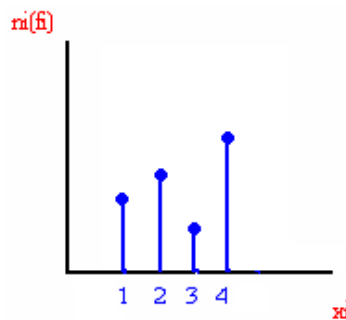
III.8.3.4 Volumes et mesures :

Exemple :



III.8.3.5 Diagrammes en bâtons :

Exemple :



III.8.4 Le rôle des graphiques :

- ❖ Validation des modèles.
- ❖ Proposer une image plus élaborée et plus synthétique de l'ensemble des observations.
- ❖ Recherche de nouvelles informations.
- ❖ Faciliter l'interactive pour faire coexister selon les besoins des types de graphiques variés.

III.9 Les outils informatiques utilisés dans la chimie :

Il existe plusieurs méthodes qui sont utilisées dans la chimie informatique, qui ont objectif de déterminer les propriétés physico-chimiques des systèmes molécules organiques, organométallique ou biologiques, tels que :

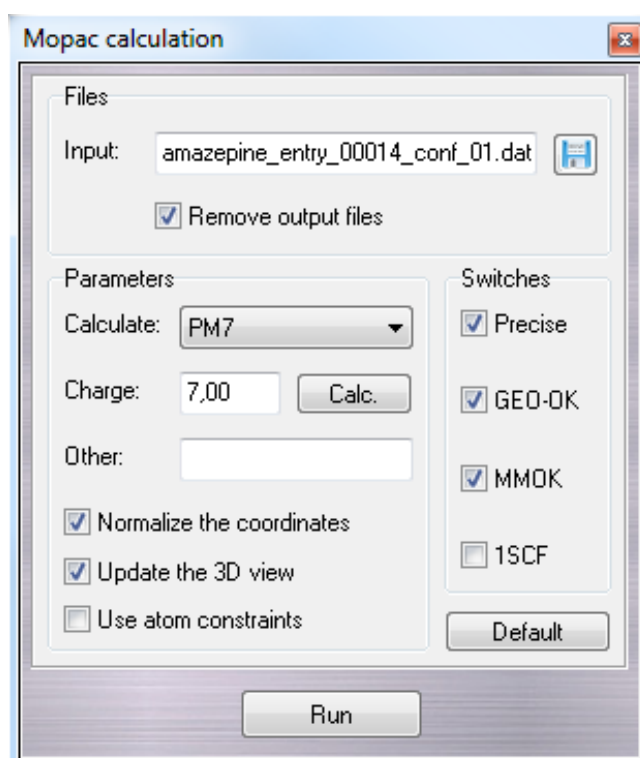
- ❖ La méthode *QSAR* (Quantitative Structure-Activity Relationship). Est une méthode de régression qui permette de faire une relation entre la structure chimique et l'activité biologique des systèmes moléculaires.
- ❖ Les méthodes *in silico* sont des méthodes utilisées pour créer des interactions intra- et intermoléculaires entre les substrats et les récepteurs.

III.9.1 Etudes des propriétés moléculaires :

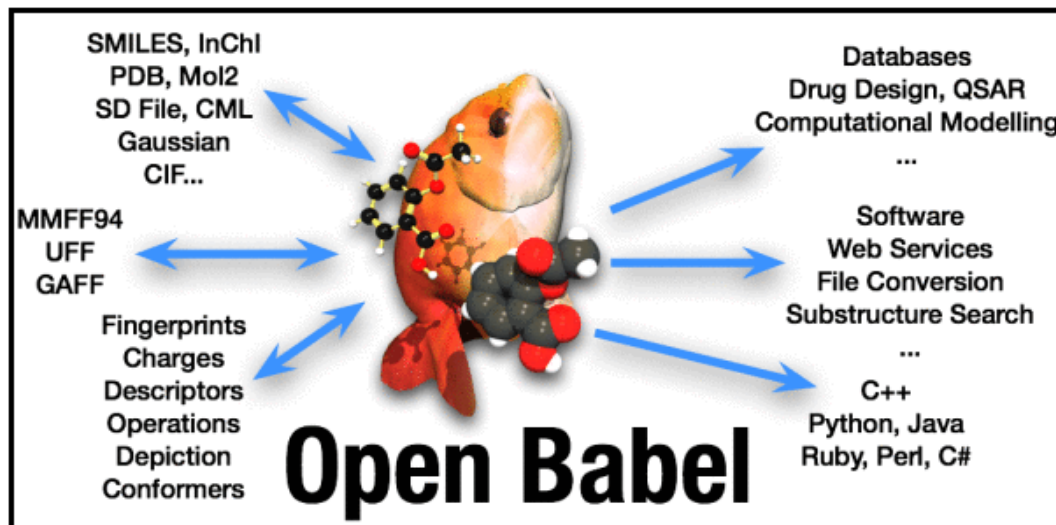
- ❖ Analyse géométrique : Analyse des paramètres géométriques, tels que les longueurs de liaison, les angles de valence, les angles dièdres,....etc.
- ❖ Analyse énergétique : Analyse des orbitales moléculaires frontières, l'énergie stérique (énergie d'élongation, de torsion), le gap énergétique, l'affinité électronique...etc.
- ❖ Analyse spectroscopique : Les spectres IR, UV-Visible, RMN...etc.

III.10 Les logiciels utilisés pour la prédiction des propriétés moléculaires :

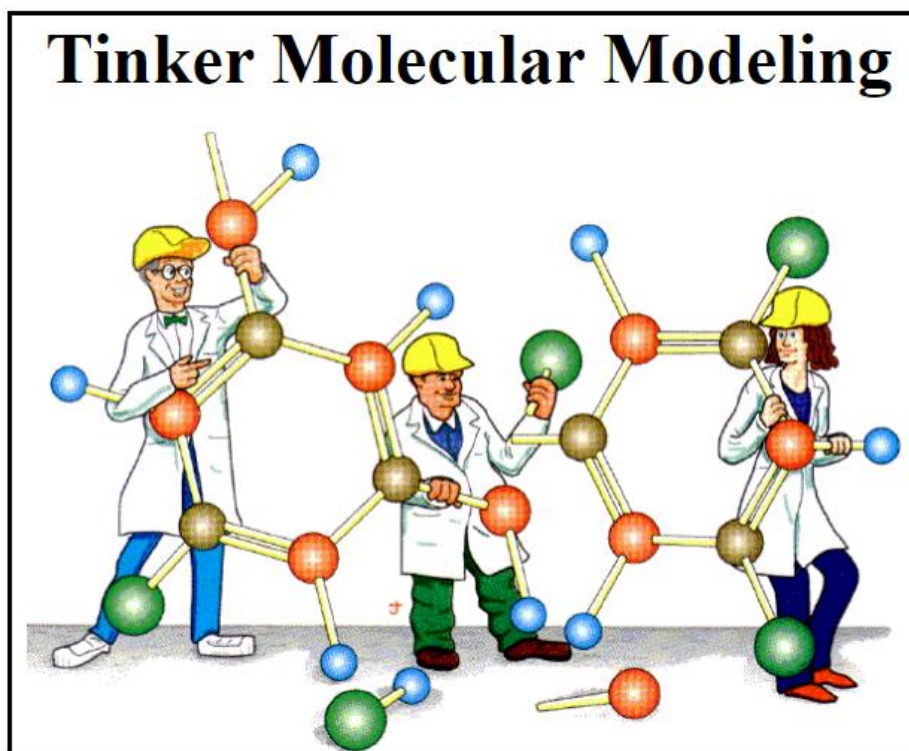
- ❖ **Mopac** : Ce logiciel est utilisé pour les calculs de type semi-empiriques.



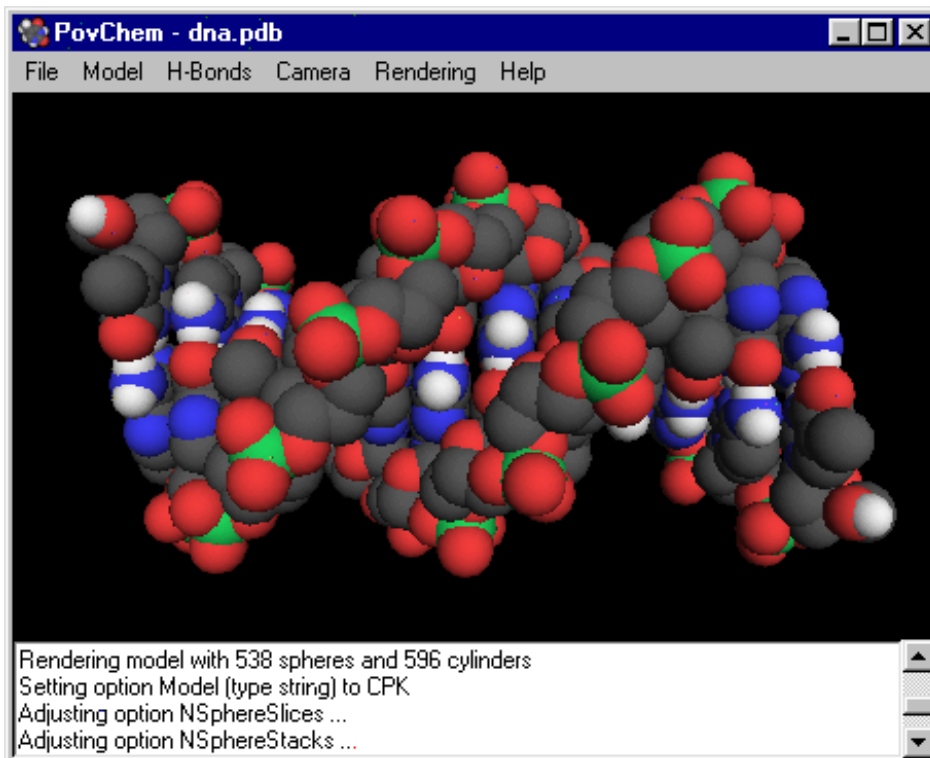
- ❖ **Open Babel** : Ce logiciel est utilisé pour convertir les fichiers de coordonnées moléculaires.



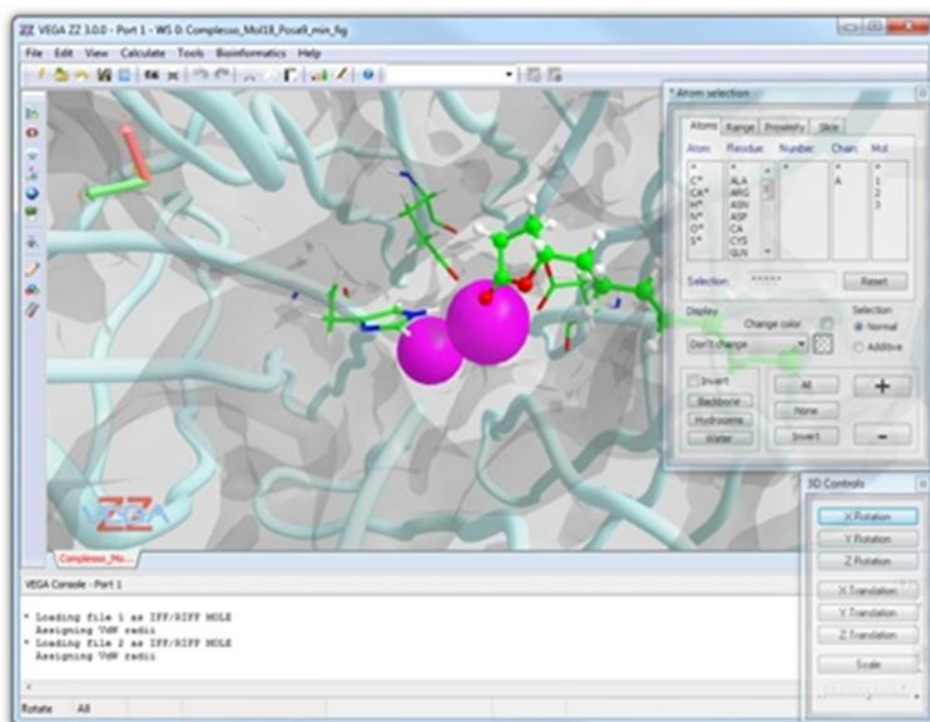
- ❖ **Tinker** : Ce logiciel est utilisé pour la mécanique et la dynamique moléculaires.



- ❖ **PovChem** : Ce logiciel est utilisé pour la création des images en 3D des systèmes moléculaires.

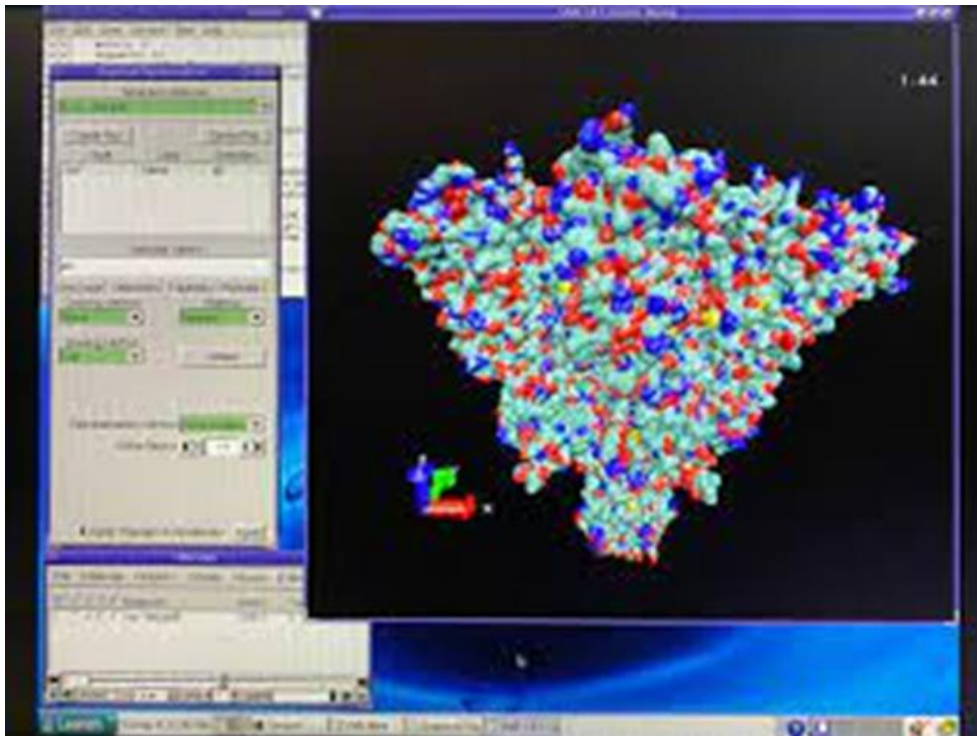


- ❖ **Vega** : Ce programme permet de calculer les propriétés moléculaires.

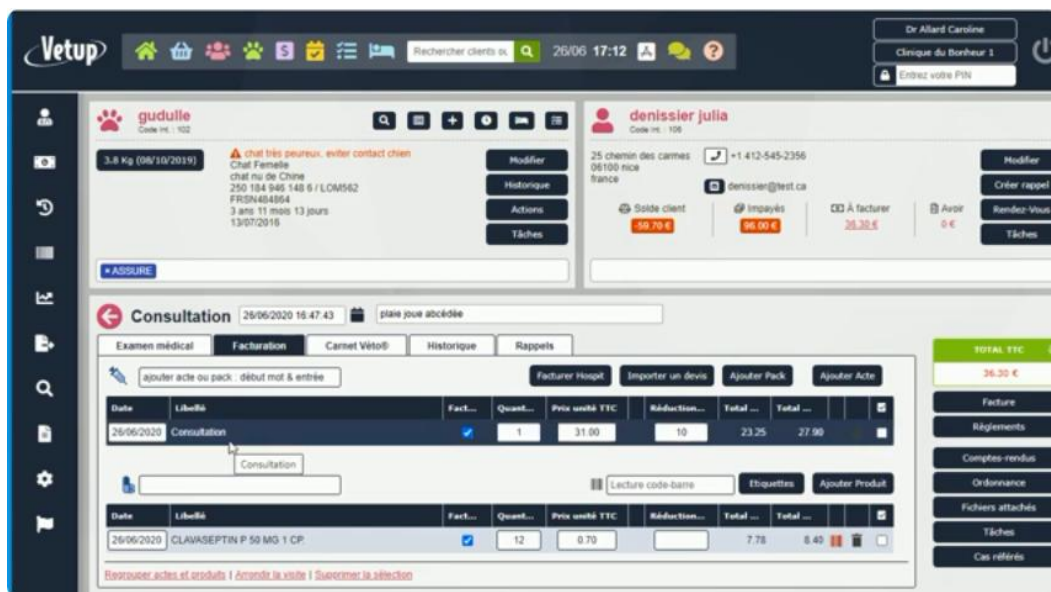


- ❖ **MMTK** : Est une extension de langage Python qui permet de créer des programmes de dynamique.

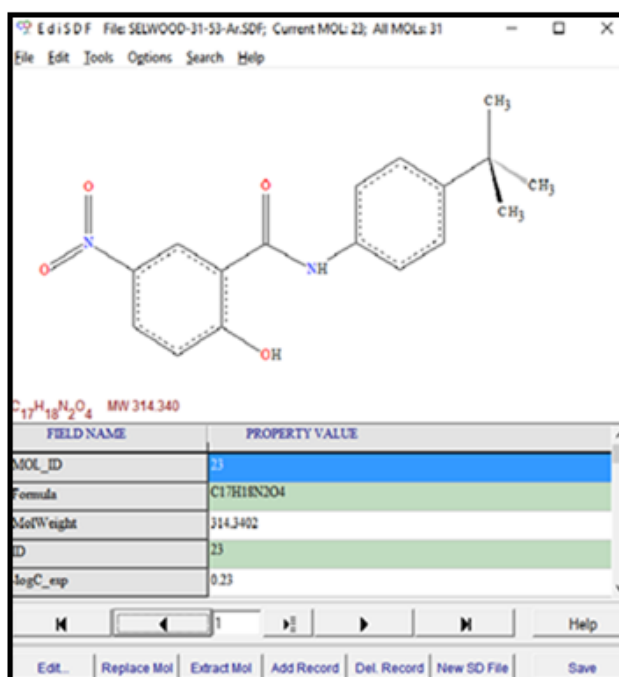
- ❖ **VMD** : Est un visualiseur de trajectoires de dynamique moléculaire.



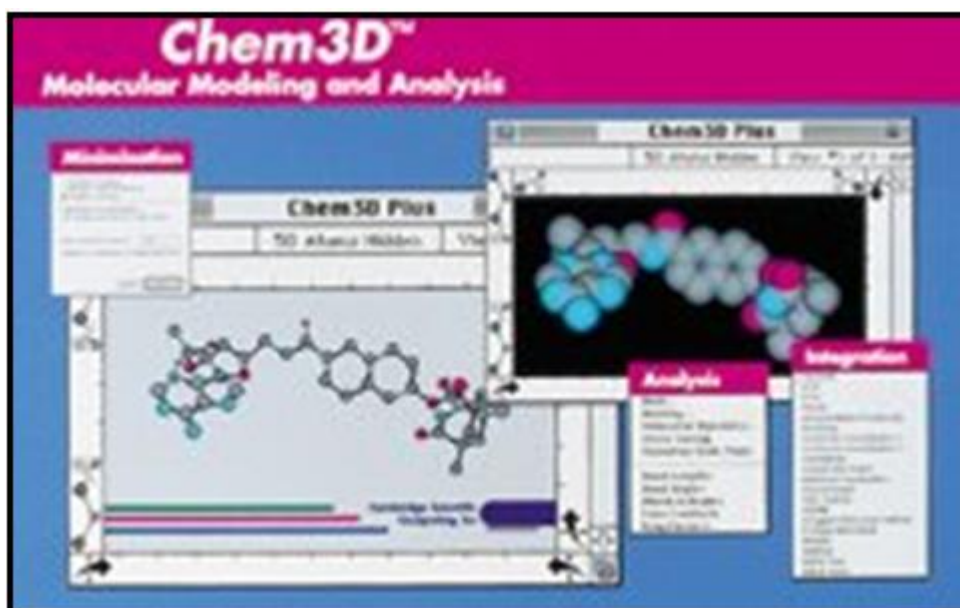
- ❖ **Epi Suite** : Est un ensemble de programmes qui permettent de calculer les différentes propriétés physico-chimiques.
- ❖ **ASV** : Est un logiciel qui permet de calculer les surfaces et les volumes de Van der Waals.



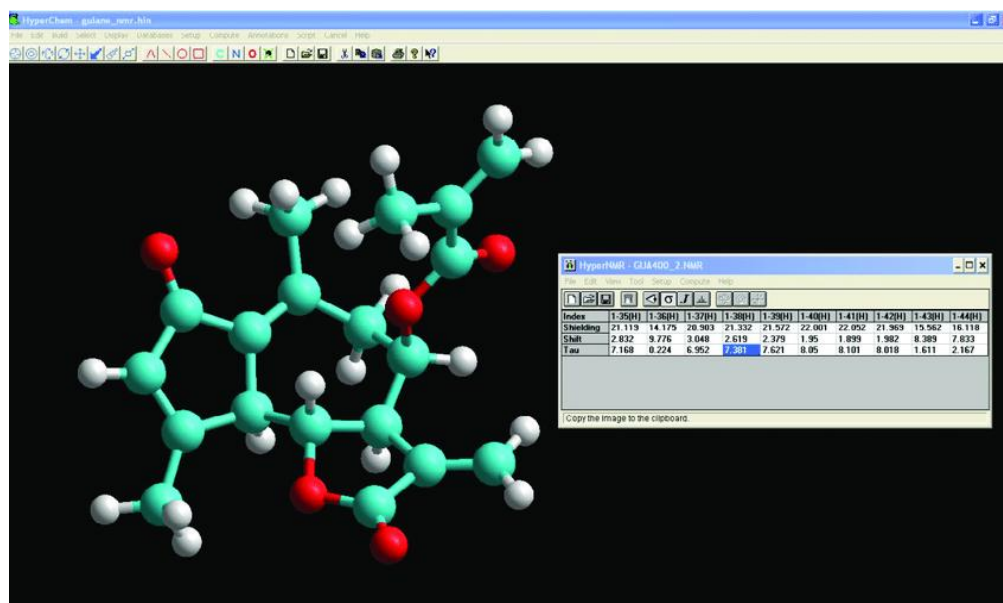
- ❖ **EPIOS** : Elucidation structurale en RMN-13C.
- ❖ **RMN1, RMN2, RELAX, CHAINE, ECHANGE** : Sont utilisés pour l'analyse des spectres RMN.
- ❖ **QCM** : Ce logiciel est utilisé pour déterminer la chiralité et la symétrie des systèmes organiques.
- ❖ **ISIDA** : Ce logiciel est utilisé dans la conception in silico.



- ❖ **Chem 3D** : Est un logiciel de visualisation moléculaire 3D des systèmes moléculaires.



- ❖ **Hyperchem** : Ce logiciel est utilisé dans la modélisation moléculaire.



- ❖ **Gaussian** : Est un logiciel de la chimie computationnelle. Créé à l'origine par John Pople et sorti en 1970 (Gaussian 70).

Le Gaussian est capable de prédire beaucoup de propriétés des molécules, réactions incluant :

- Energies et structures des molécules.
- Energies et structures des états de transition.
- Energies de liaison ou de réactions.
- Paramètres géométriques, distances, angles dièdres, angles de torsion.
- Orbitales moléculaires.
- Charges atomiques et moments dipolaires.
- Potentiel d'ionisation.
- Potentiel électrostatique.
- Paramètres des spectres RMN, fréquences de vibrations, spectres IR, UV...etc.

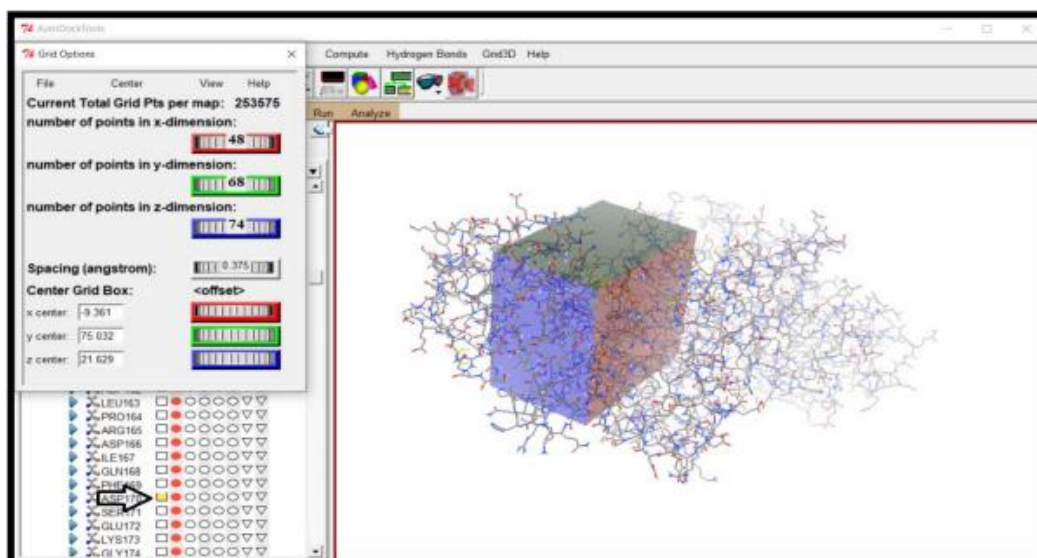


III.11 Logiciels utilisés pour la prédiction des propriétés biologiques :

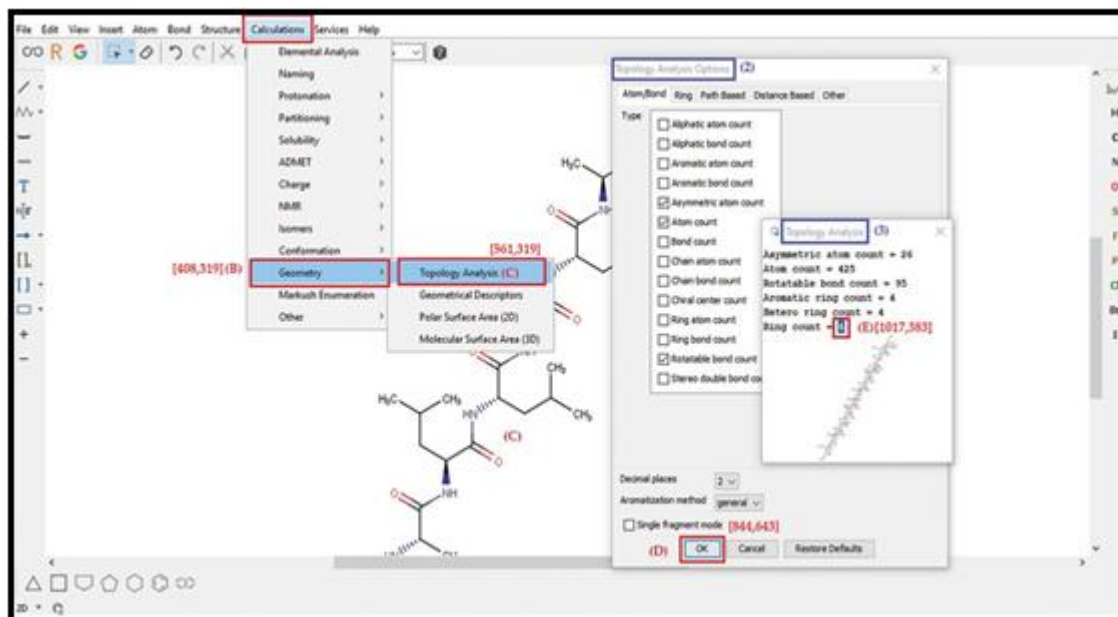
- ❖ **AutoDock** : Ce logiciel est utilisé dans le docking moléculaire. Il permet de lier les médicaments ou les composés bioactives à un récepteur de structure 3D.

On a deux types de logiciels autodock :

- ☞ **AutoDock Vina** : (<http://vina.scripps.edu/download.html>).
- ☞ **AutoDockTools** : (<http://autodock.scripps.edu/resources/adt>).



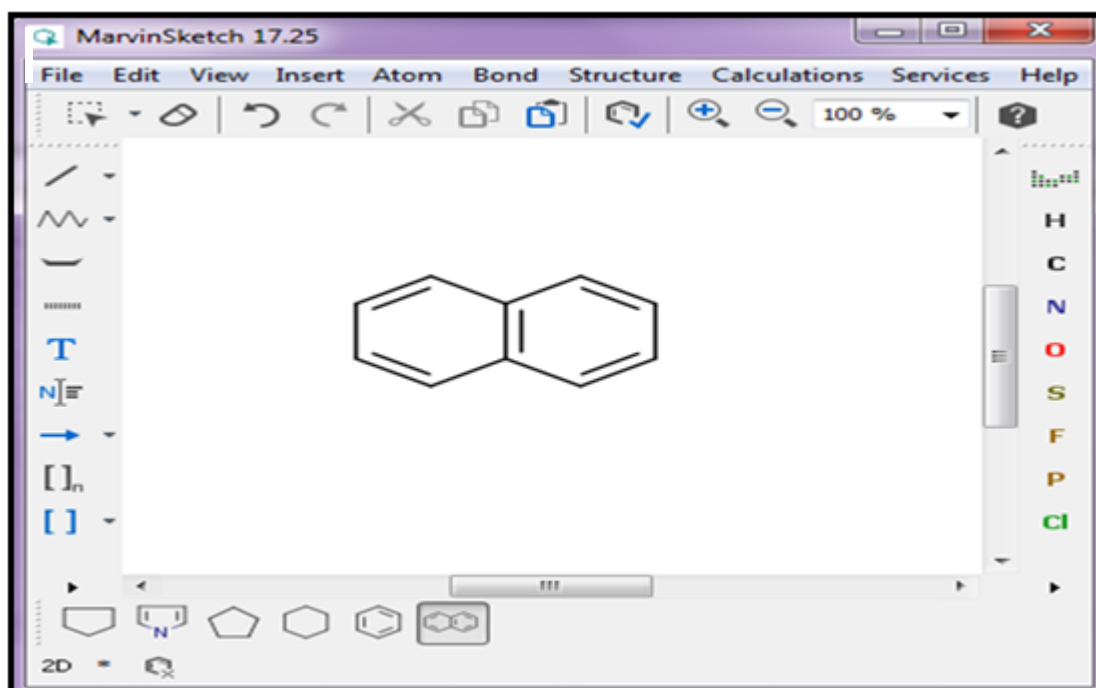
- ❖ **Marvin** : Est un logiciel utilisé pour éditer et vérifier les structures moléculaires, et aider les chimistes dans la création et la visualisation de structures moléculaires.



- ❖ **MarvinSketch** : (<https://chemaxon.com/products/marvin>).

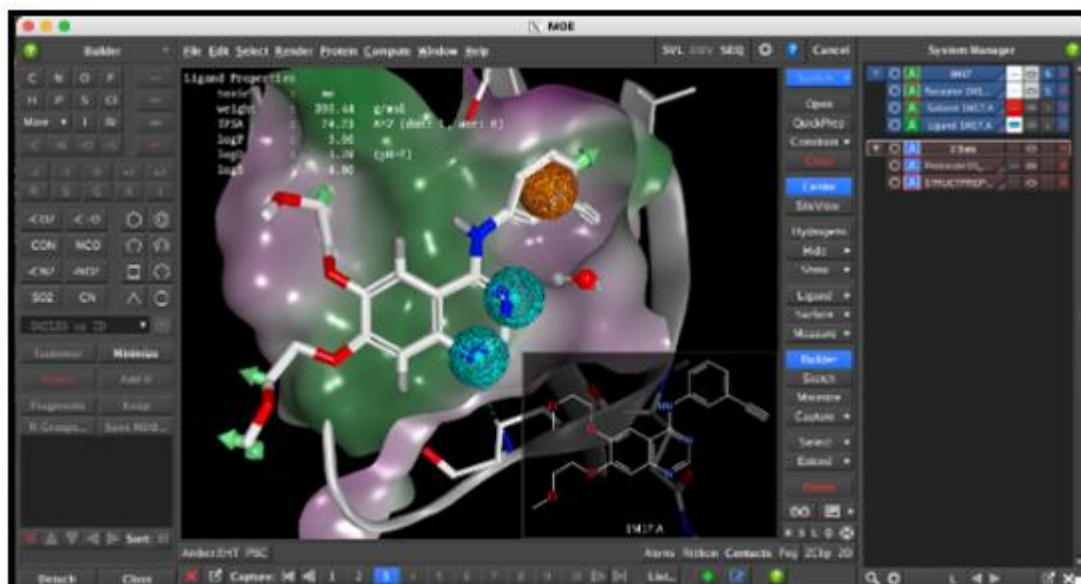
A l'aide de ce programme, il est possible de :

- Créer et de restituer des structures 3D.
- Ajouter ou de modifier des groupes et des réactions.
- Définir des attributs.

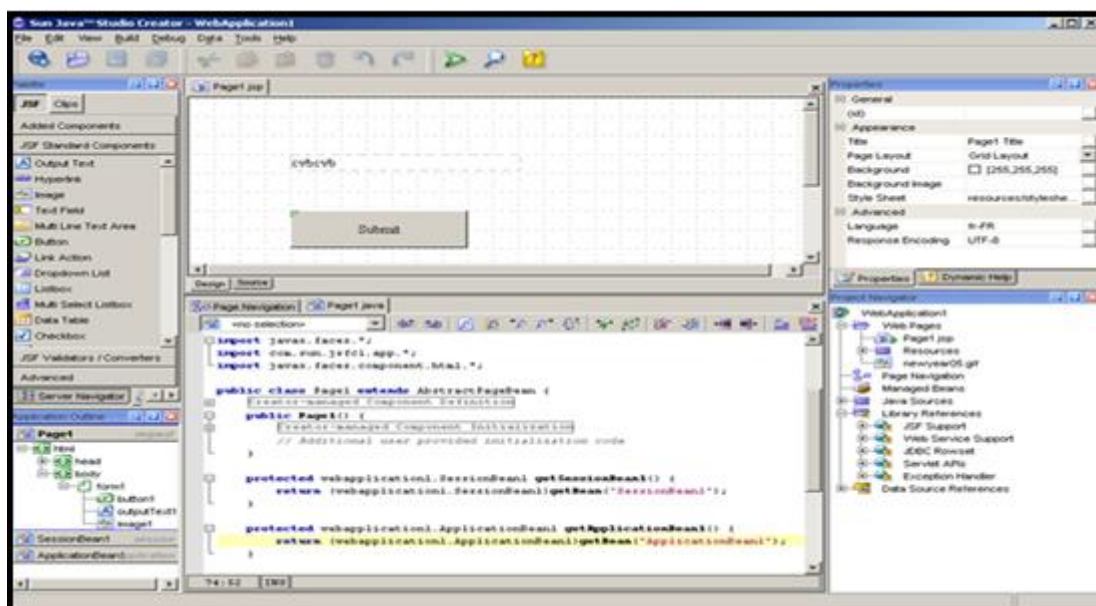


❖ **MOE** : Est un logiciel utilisé pour :

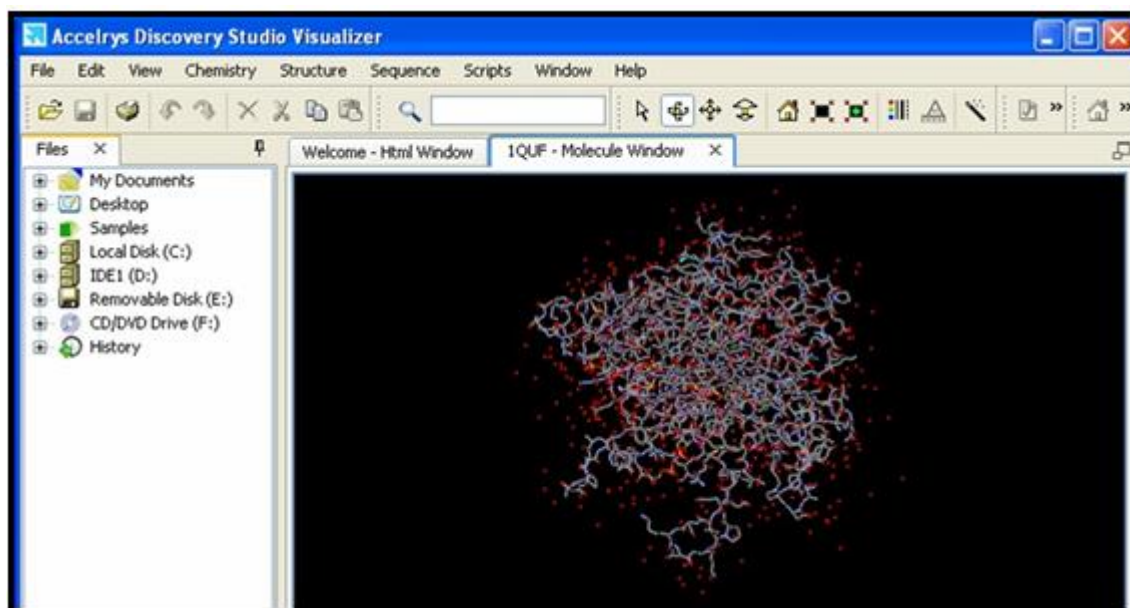
- Conception basée sur la structure.
- Explorateur SAR.
- Conception basée sur les ligands.
- Modélisation des protéines.
- Criblage virtuel.
- Découverte basée sur les fragments.
- Modélisation des peptides.
- Criblage virtuel des agents biologiques guidé par des pharmacophores.
- Cartographier en 2D les différences et la moyenne statistique des surfaces électrostatiques et hydrophobes des protéines.
- Prédire les spectres ECD et ORD pour déterminer la stéréochimie et les ensembles conformationnels.
- Interprétation des nucléotides modifiés, ainsi que de leur état de protonation et de tautomérisation.
- Filtrer interactivement les entrées de la base de données.
- Identifier l'espace chimique d'intérêt à l'aide des cartes thermiques.
- Prédire l'activité ou les propriétés à partir de modèles QSAR/QSPR personnalisés.



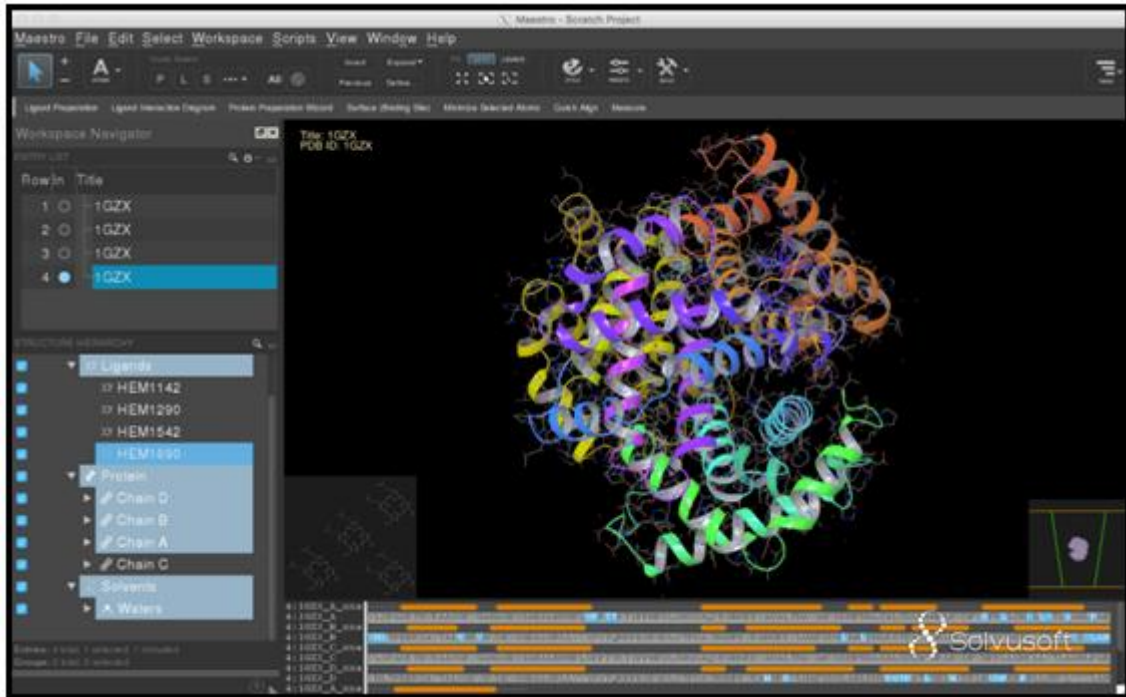
❖ **Java** : Est un logiciel calcul lancé par Sun Microsystems en 1995. Beaucoup d'applications numériques reposent sur le Java.



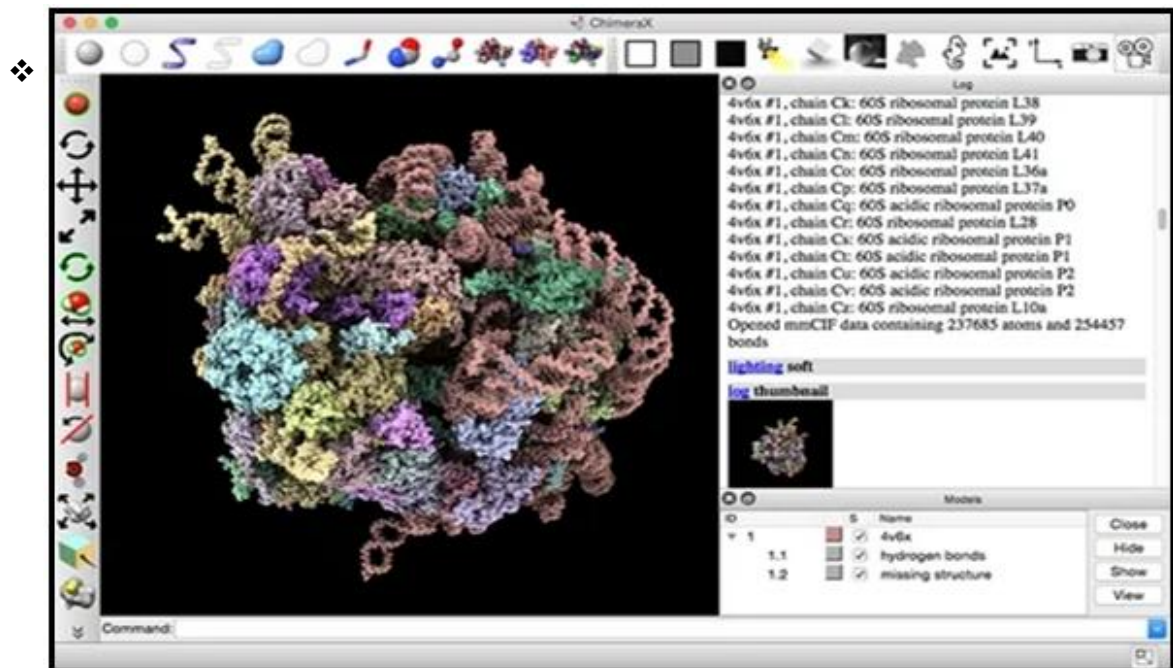
- ❖ **Discovery Studio** : Est un logiciel permet de simuler des systèmes de petites molécules et de macromolécules.



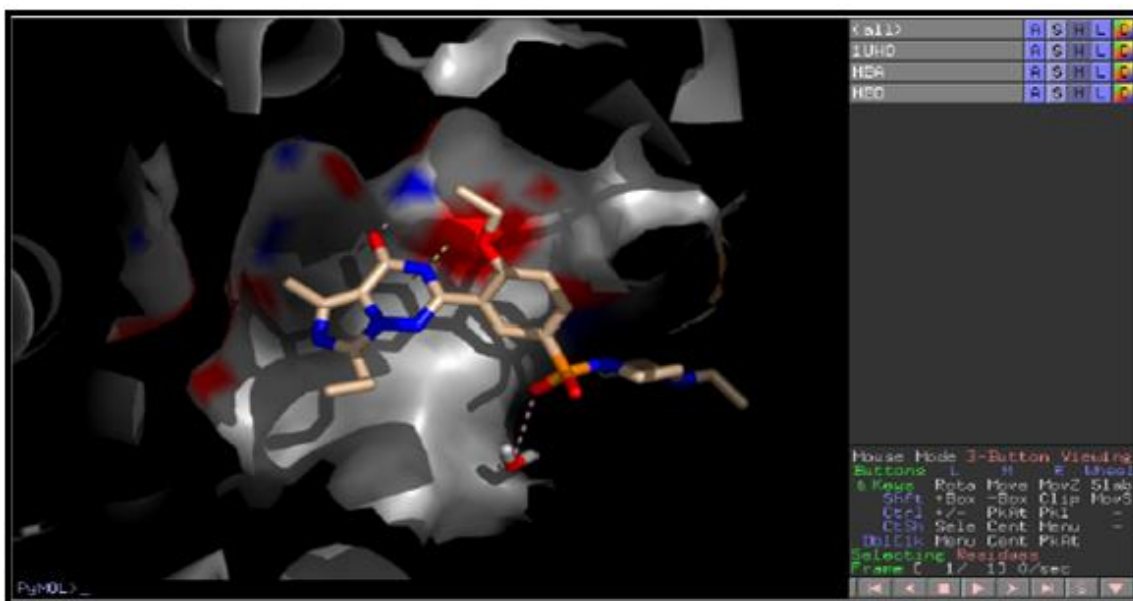
- ❖ **Maestro** : Maestro est un puissant environnement de modélisation moléculaire polyvalent et interface unifiée pour tous Schrödinger software. Il supporte de nombreux formats de fichiers courants pour l'entrée structurale. De plus, est un outil de construction complet intuitive, pour la construction de modèles moléculaires de tout type.



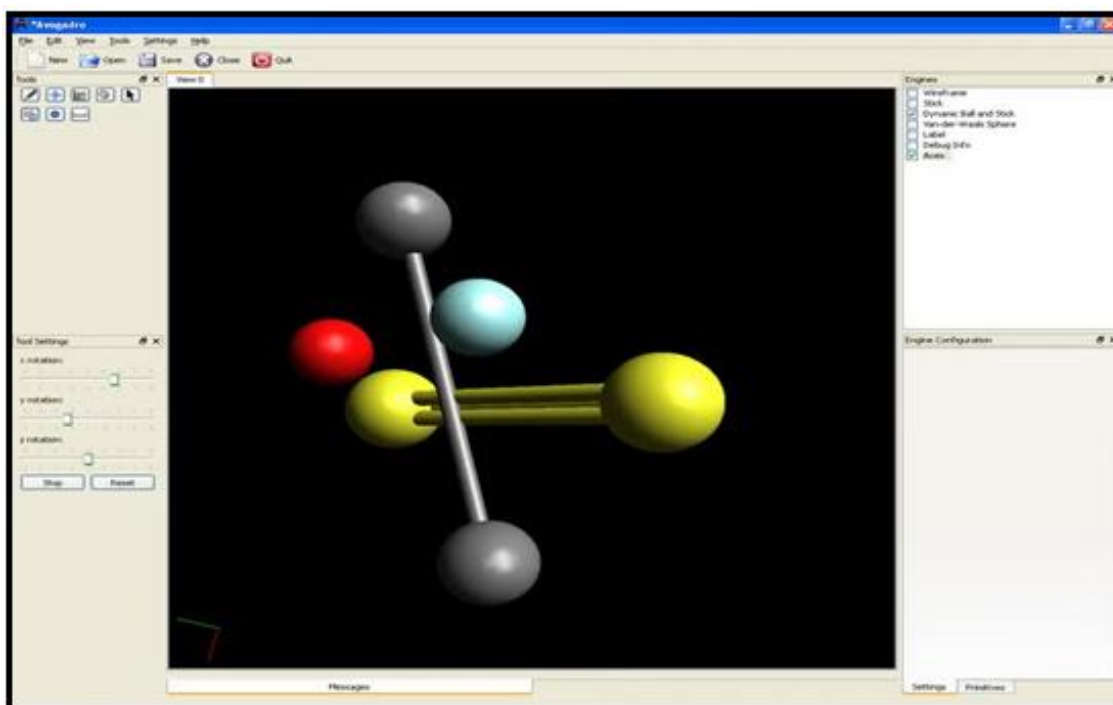
❖ Chimera : (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/download.html>).



- ❖ Pymol : (<https://pymol.informer.com/2.3/>).



- ❖ Avogadro : (<https://sourceforge.net/projects/avogadro/>).



Applications :

1. Faire le docking moléculaire entre la protéine le cyclo-oxygénase iso et le ligand celecoxib en utilisant :

- Le logiciel Autodock tools 4.2.
- Le logiciel Maestro pour la préparation des deux entités (Protéine et ligand).
- La base de données PDB (ID : 3KK6).

1.1 Analyser et interpréter les résultats obtenus.

2. Pour chaque molécule (Candesartan, Losartan et valsartan), et à l'aide du programme ADF12, la fonctionnelle GGA-PBE et la base TZP :

2.1 Faire un calcul d'optimisation.

2.2 Faire un calcul de fréquence et dessiner le spectre IR de chaque molécule.

2.3 Calculer les descripteurs de la réactivité globale.

2.4 Représenter les orbitales moléculaires frontières HOMO et LUMO.

2.5 Analyser et interpréter les résultats obtenus.

IV. Représentation et visualisation de molécules

IV.1 Introduction :

La chimie théorique correspond globalement à la représentation mathématique de l'information chimique, tandis que la chimie informatique est utilisée pour désigner un ensemble de techniques utilisées pour résoudre des problèmes de chimie à l'aide d'ordinateurs.

Les propriétés physico-chimiques des composés moléculaires sont déterminées à partir des représentations 3D.

IV.2 Historique :

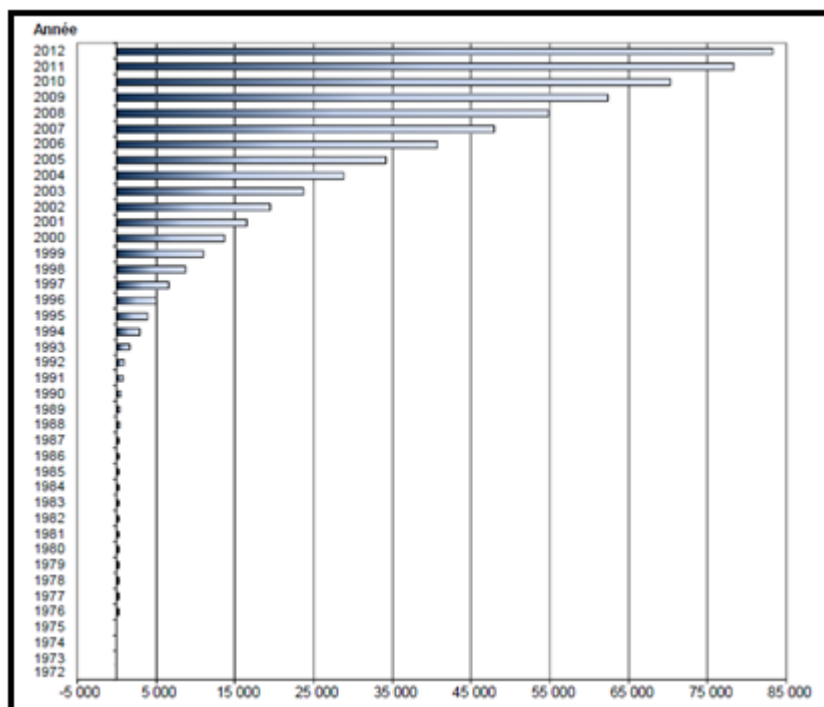
- ✚ **En 1951** : Linus Pauling et ses collaborateurs déterminent la structure secondaire en hélice α et feuillet β des protéines.
- ✚ **En 1958** : Kendrew et son équipe déterminent la première structure d'une protéine, la myoglobine de cachalot.
- ✚ Depuis les années **1930**, l'attribution de fonction élémentaire aux macromolécules biologiques occupe une place majeure en biologie.
- ✚ **En 1966** : Au MIT, qu'a eu lieu la première visualisation moléculaire virtuelle avec Cyrus Levinthal.
- ✚ **En 1993** : Roger Sayle met dans le domaine public le logiciel RasMol qu'il a développé.
- ✚ **En 1992** : RasMol a été développé.
- ✚ **En 2002** : (Bernstein). RasMol sera par la suite un logiciel largement employé pour être, en 1995, le plus utilisé au monde (Sayle & Milner-White, 1995). Après RasMol, de nombreux logiciels de visualisation moléculaire sont apparus.

IV.3 Problématiques :

Pour faire une représentation claire et nette, il faut comprendre premièrement la structure des systèmes.

Au niveau microscopique, il est très difficile à comprendre les représentations et les images en 3D et les symboles des structures moléculaires.

La figure ci-dessous représente le nombre total de structures dans la PDB.



IV.4 Objectif :

- ❖ La visualisation moléculaire permet de dessiner des structures moléculaires de façon très claire.
- ❖ Donner beaucoup d'informations sur les différentes propriétés moléculaires.
- ❖ Permettre de repérer une poche hydrophobe dans une protéine en observant qu'il y a une forte concentration d'acides aminés hydrophobes qui forment une zone concave.
- ❖ Donner une bonne compréhension des représentations moléculaires.
- ❖ Prédire le rôle et la fonction de cette structure.

IV.5 Qu'est-ce qu'une molécule ?

Une molécule est un ensemble des atomes qui sont liés par des liaisons chimiques. Elle peut exister dans l'état neutre, ion, ou radical.

IV.6 Représentation des composés chimiques :

Pour représenter une molécule sur un ordinateur, il faut choisir un outil informatique qui permet de donner une structure 2D ou 3D très claire.

IV.7 Visualisation d'une molécule :

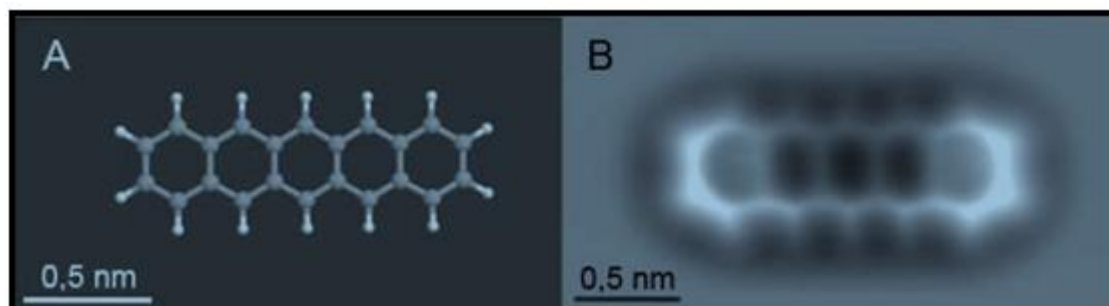
Les ordinateurs renforcent la compréhension générale des produits chimiques en fournissant une interface de visualisation graphique appropriée. Cela englobe la visualisation

des structures chimiques uniques selon le modèle d'interaction hypothétique entre les molécules.

IV.7.1 Visualisation d'une molécule au microscope :

Il existe deux autres types de microscopie :

- ❖ La microscopie électronique.
- ❖ La microscopie à sonde locale, qui utilise un faisceau de photons.



IV.7.2 Visualisation d'une molécule passe par la construction des modèles :

IV.7.2.1 Représentation d'une molécule :

De tels outils permettent de dessiner une structure chimique dans un espace de travail dans le bureau. En utilisant cet outil, un utilisateur peut dessiner des structures utilisant divers outils de liaison chimique, atomes, chaînes, des cycles et autres éléments.

Les structures sont codées sous forme de coordonnées qui sont converties graphiquement en images sur l'écran de l'ordinateur. La même structure peut être affichée sous différentes formes graphiques: stick, ball-and-stick, remplissage d'espaces, maillage.

a/ Représentation d'une molécule en 2D :

Représentation de toutes les liaisons chimiques et de tous les atomes d'une molécule.

Il existe plusieurs type de représentation en 2D, tel que :

- ☞ **La formule brute** : La formule brute donne la nature et le nombre des atomes dans une molécule.

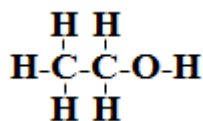
Exemples :

- La formule brute de l'Ethanol est C_2H_6O .
- La formule brute de l'Urée est CH_4ON_2 .

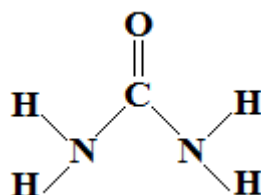
- ☞ **La formule développée** : Cette formule indique l'enchaînement des atomes qui la constituent et toutes les liaisons entre les atomes sont représentées par des traits.

Exemples :

- La formule développée de l'Ethanol est :



- La formule développée de l'Urée est :



☞ **La formule semi-développée :** Cette formule indique l'enchaînement des atomes qui la constituent et les liaisons impliquant un atome d'hydrogène ne sont pas représentées. Le nombre d'atomes d'hydrogène est précisé par un indice à droite du symbole H.

Exemples :

- La formule semi-développée de l'Ethanol est : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$

- La formule semi-développée de Butane est : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

☞ **La formule condensée :** Est une formule où les liaisons C-C et C-H n'apparaissent pas.

Exemples :

- La formule semi-développée de l'Octane est : $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

- La formule semi-développée de Butanol est : $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

☞ **La formule topologique :** Est une formule où tous les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène ne sont pas représentés et la chaîne carbonée disposée en Zig-Zag. Les groupements fonctionnels sont représentés de façon semi-développée.

Exemples :

- La formule semi-développée de l'Octane est : 

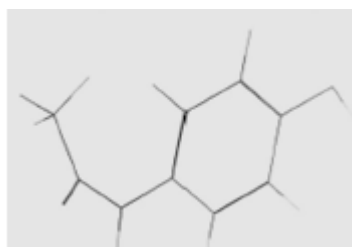
- La formule semi-développée de Butanol est : 

b/ Représentation d'une molécule en 3D :

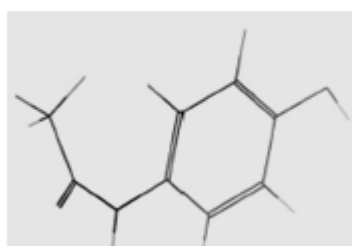
Il existe plusieurs types de la représentation d'une molécule en 3D :

❖ Wireframe :

Dans ce type, tous les atomes sont représentés par sommets et les liaisons chimiques par des lignes colorés.

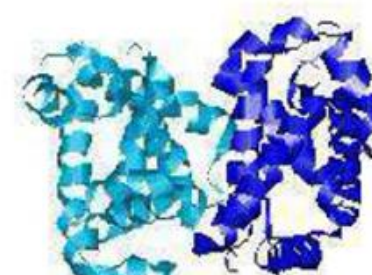
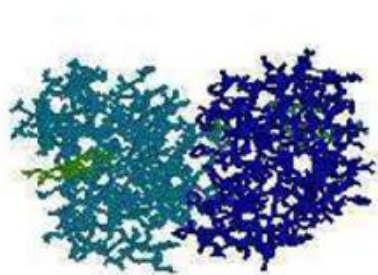
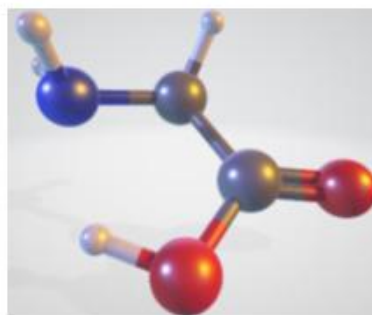
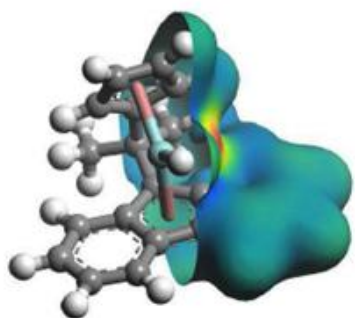
Exemples :**❖ Stick :**

C'est une version plus consistante du mode Wireframe où les liaisons sont indiquées par des bâtons colorés.

Exemples :**❖ Ball and stick (boules et bâtons) :**

Dans ce type, les liaisons sont représentées par des bâtons et de mêmes couleurs que les atomes correspondants.

Exemples :



❖ **Compact :**

Cette représentation est utilisée pour représenter l'encombrement spatial du nuage électronique de l'atome et les rayons de covalence (La distance internucléaire entre deux atomes).

Les représentations moléculaires en 3D sont déterminées par des méthodes physiques :

- La diffractométrie de rayons X.
- La spectroscopie par résonance magnétique nucléaire (RMN).

IV.8 L'importance de la visualisation moléculaire :

La connaître des structures moléculaires et leurs représentations en 3D a permis de :

- ❖ Améliorer la médecine.
- ❖ Le développement et la conception de nouveaux médicaments.
- ❖ La prédiction des propriétés pharmacologiques.
- ❖ La prédiction des activités biologiques des systèmes biologiques.
- ❖ Comprendre les propriétés structurales, énergétiques et spectroscopiques des macromolécules.

IV.9 Bases de données :

Une base de données est un ensemble de données expérimentales permettant le stockage de grandes quantités d'informations.

(<http://www.webadev.com/lexique-b-base-dedonnees.php>).

IV.9.1 Historique :

IV.9.1.1 Premiers développements :

✚ En 1965 : Première compilation papier ‘Atlas of Protein Sequences’.

IV.9.1.2 Premiers supports informatiques :

✚ En 1971 : Première version de la PDB au Brookhaven National Laboratory.

✚ 1981-1982 : Premières versions de EMBL et Genbank.

✚ En 1986 : Première version de Swissprot.

✚ En 2002 : Première version de Genbank WGS.

IV.9.1.3 État actuel :

✚ En 2013 (Oct) : Genbank rel 197 contient 167 295 840 entrées et 154 192 921 011 bases.

✚ En 2013 (Oct) : PDB comporte 94 540 structures dont 87 516 de protéines.

IV.9.2 Les éléments constitutifs d'une base de données :

- Tables.
- Fichiers et formats.

Exemple : Une table constitue une base de données selon le modèle rationnel.

N° carte	Nom	Prénom	Date de naissance	Filière
AAA1	Nom1	Prénom1	DN1	Chimie
AAA2	Nom2	Prénom2	DN2	Biochimie
AAA3	Nom3	Prénom3	DN3	Physique
AAA4	Nom4	Prénom4	DN4	Microbiologie
AAA5	Nom5	Prénom5	DN5	Ecologie

IV.9.3 Les avantages et les inconvénients des bases de données :

IV.9.3.1 Les avantages :

❖ **Centralisation** : Toutes les données sont regroupées dans une seule structure centrale.

Exemple : Un serveur à distance.

❖ **Indépendance entre données et programmes** : Peu importe les programmes que vous les utilisez, vous pouvez utiliser et manipuler les données de votre base de données.

- ❖ **Intégration des liaisons entre les données** : Existence des liaisons entre les données au sein de la BD.
- ❖ **Intégrité des données** : L'assurance de la validité des données grâce à un ensemble des règles.

IV.9.3.2 Les inconvénients :

- ❖ Difficile à interroger.
- ❖ Problème de répétition.
- ❖ Problème technique puisque en utilisant l'internet.

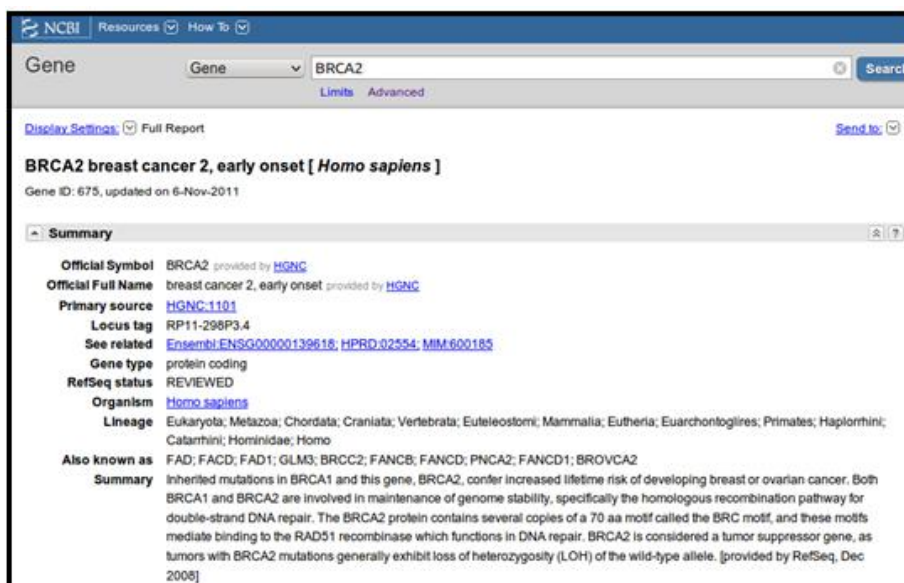
IV.9.4 Les différents types de bases de données :

Est une grande bibliothèque de données résultant des expériences dans les laboratoires du monde.

Nous distinguerons deux types de bases de données :

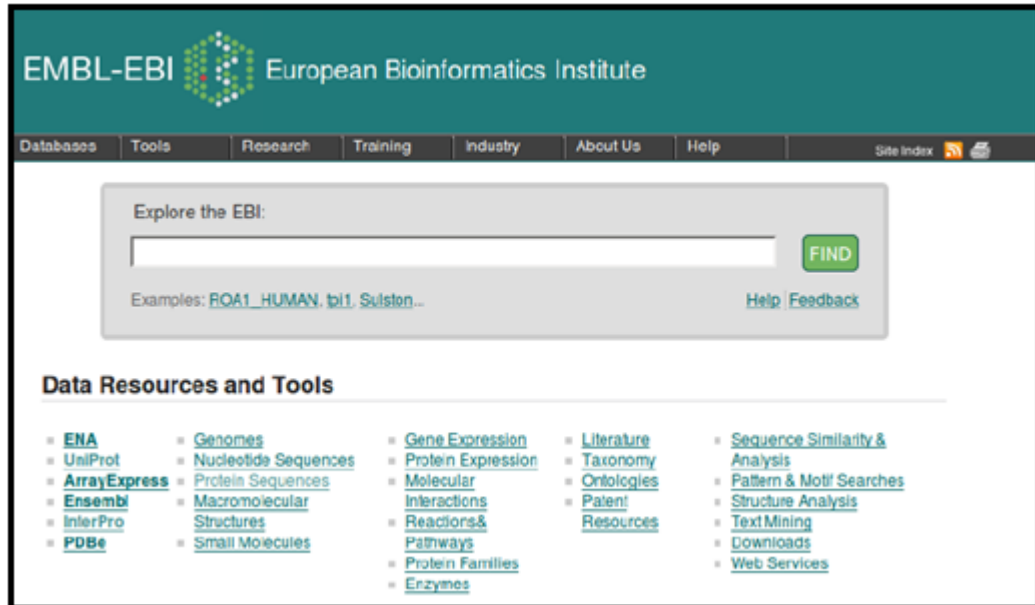
IV.9.4.1 Bases de données généralistes :

- ❖ **DDBJ** : (<http://www.ddbj.nig.ac.jp/searches-e.html>).
- ❖ **GenBank de NCBI** : (National Center for Biotechnology Information). (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>)

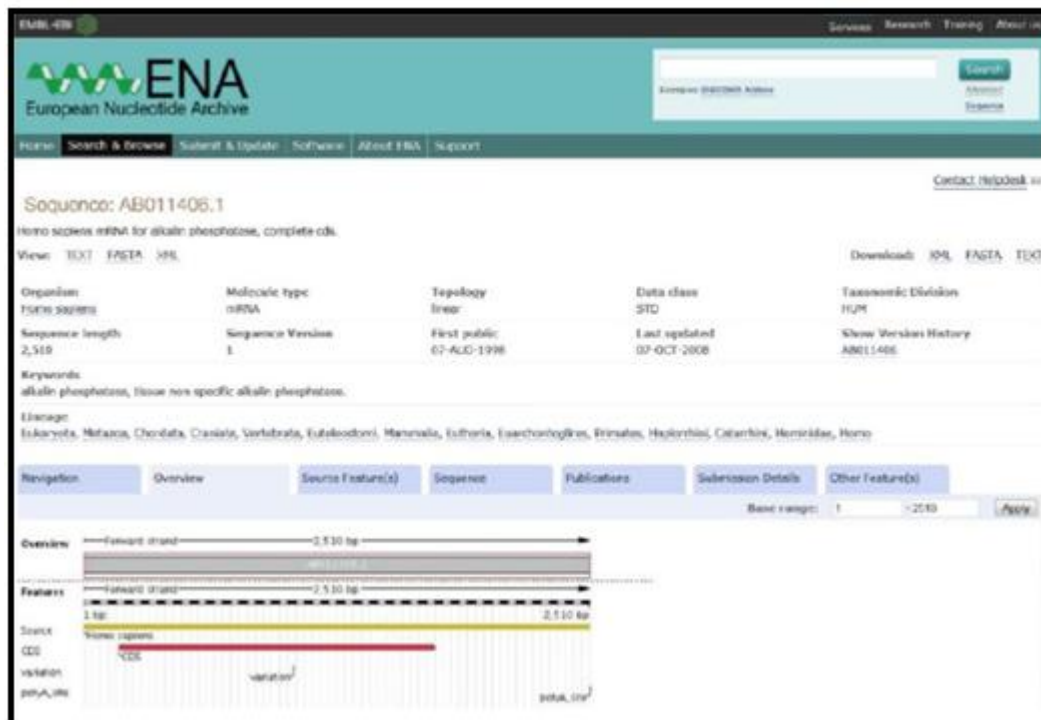


The screenshot shows the NCBI Gene database interface for the BRCA2 gene. The search bar at the top contains 'BRCA2' and the search button is labeled 'Search'. Below the search bar, there are options for 'Limits' and 'Advanced'. The main content area displays the gene name 'BRCA2 breast cancer 2, early onset [Homo sapiens]' and the Gene ID: 675, updated on 6-Nov-2011. A 'Summary' section is expanded, showing various fields: Official Symbol (BRCA2), Official Full Name (breast cancer 2, early onset), Primary source (HGNC:1101), Locus tag (RP11-298P3.4), See related (Ensembl: ENSG00000139618; HPRD:02554; MIM:600185), Gene type (protein coding), RefSeq status (REVIEWED), Organism (Homo sapiens), Lineage (Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorhini; Catarrhini; Hominidae; Homo), and Also known as (FAD; FACD; FAD1; GLM3; BRCC2; FANCB; FANCD; PNCA2; FANCD1; BROVCA2). A detailed summary text is provided at the bottom of the section.

- ❖ **EMBL** de **EMBO** : (European Molecular Biology Organization). (<http://www.ebi.ac.uk/embl/>).



- ❖ **ENA** :



❖ Bases de séquences protéiques :

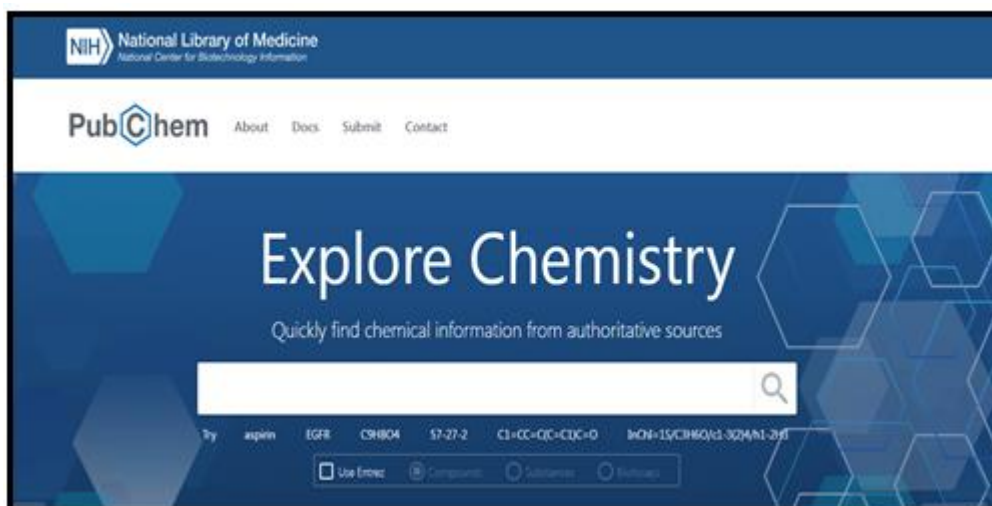
- Uniprot : (<http://www.uniprot.org/>).

- SwissProt : SwissProt remplit manuellement à partir de publications.

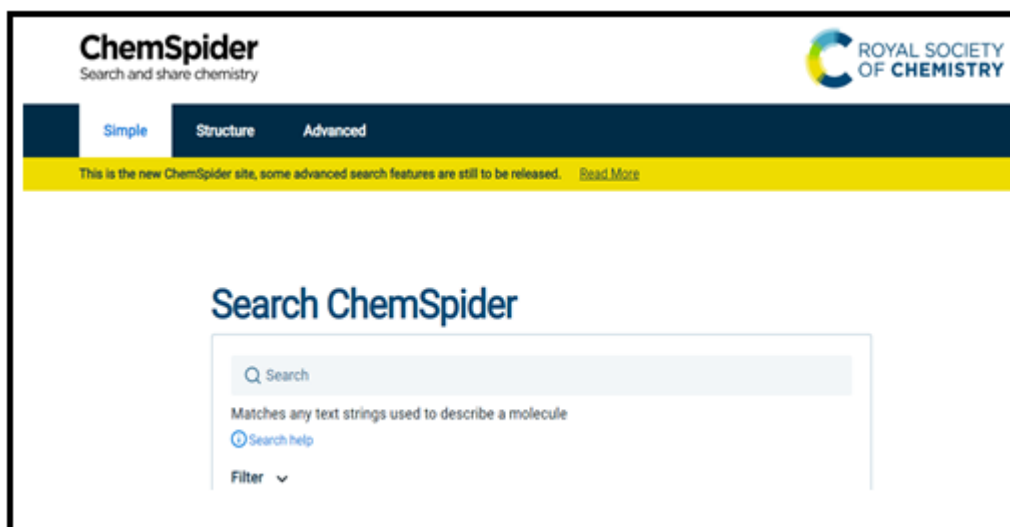
❖ Bases génomique et localisation : Génome.

❖ Base de structure 3D de macromolécules (PDB) : (<http://www.rcsb.org>).

- ❖ **PubChem** : (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>).



- ❖ **ChemSpider** : (www.ChemSpider.com).



- ❖ **Bases de données bibliographiques** : Cette base de données est utilisé dans la recherche scientifique.

IV.9.4.2 Bases de données spécialistes :

- ❖ **DrugBank** : (<http://www.drugbank.ca/>).



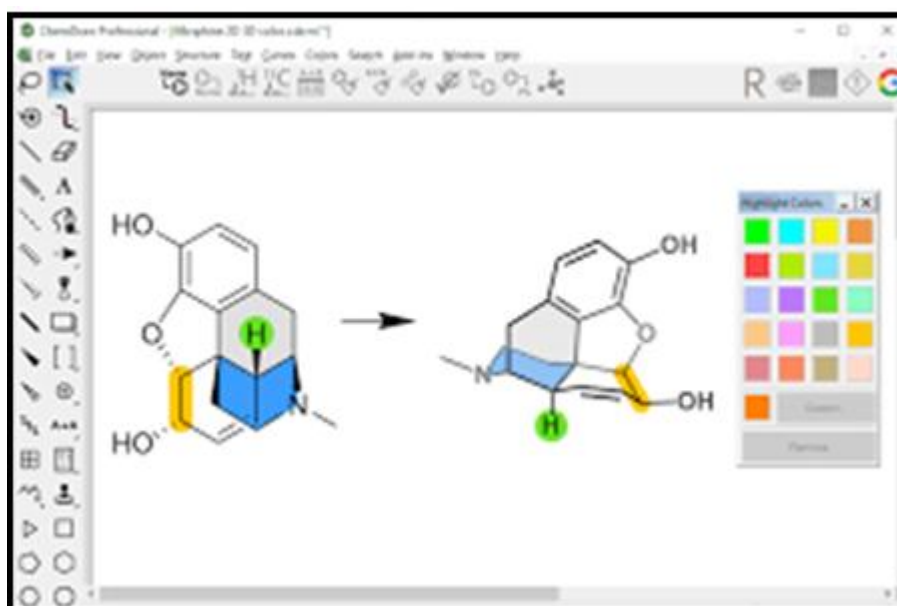
IV.10 Logiciels utilisés pour la représentation des molécules (Structures 2D) :

Les logiciels de la représentation moléculaire sont gratuits (Open source). On peut déterminer une représentation moléculaire à partir de :

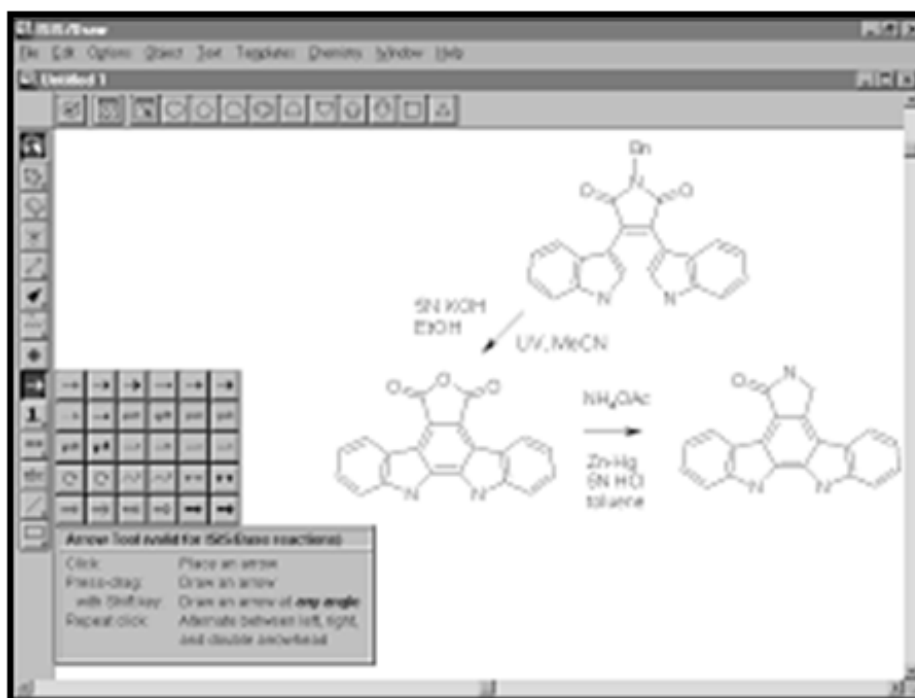
- ❖ Fragments moléculaires.
- ❖ Une représentation moléculaire en 2D.
- ❖ Les coordonnées cif des structures de RX.
- ❖ Une base de données.

Exemples des logiciels :

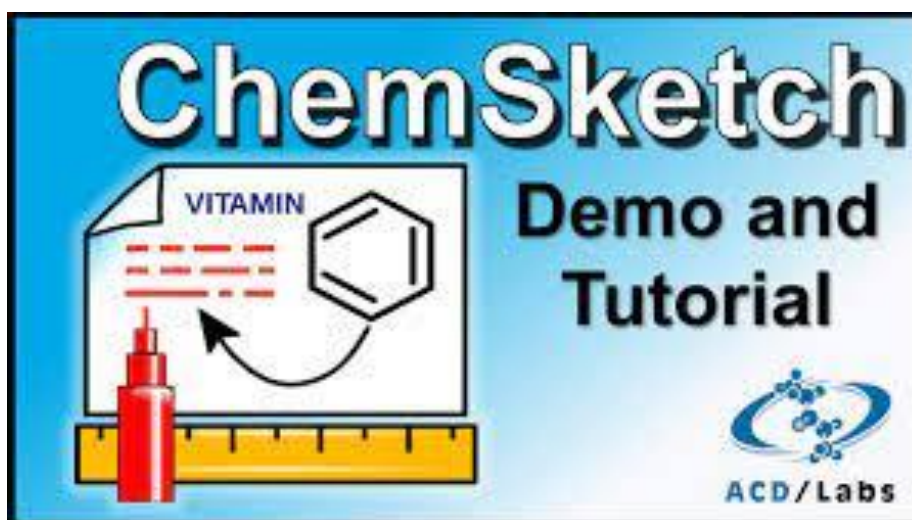
- ❖ ChemDraw : (http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemDraw/)



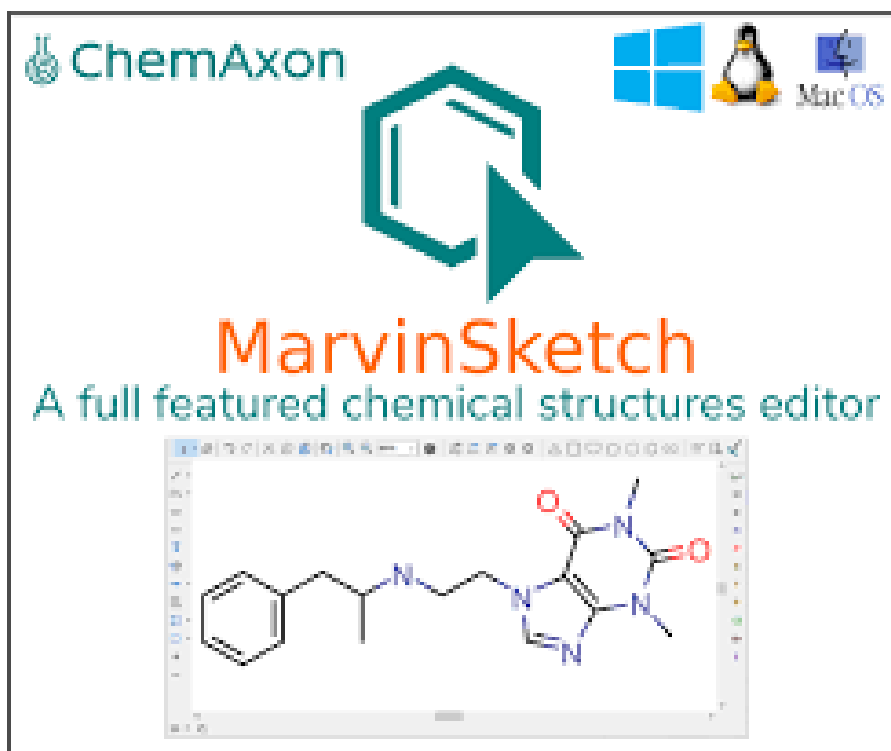
❖ IsisDraw :



❖ ChemSketch : (http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/draw/chemsketch/).



- ❖ **MarvinSketch** : (<https://www.chemaxon.com>).

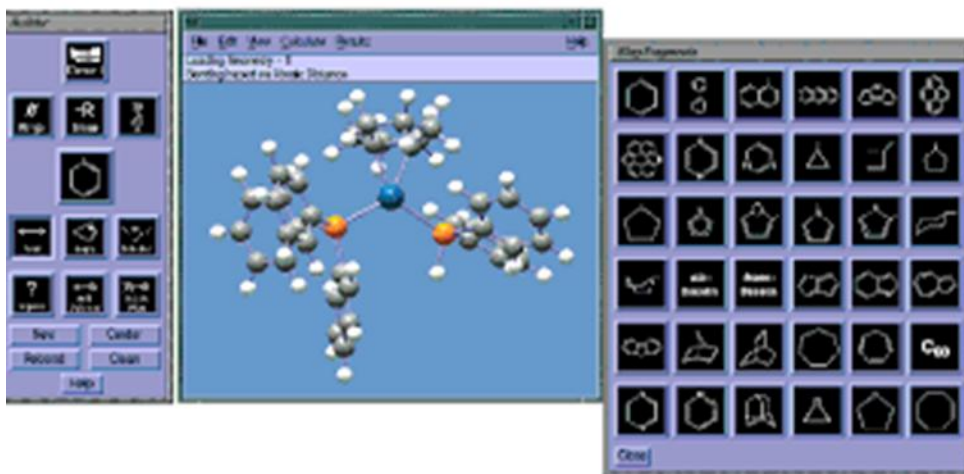


IV.11 Logiciels de la visualisation des structures 3D :

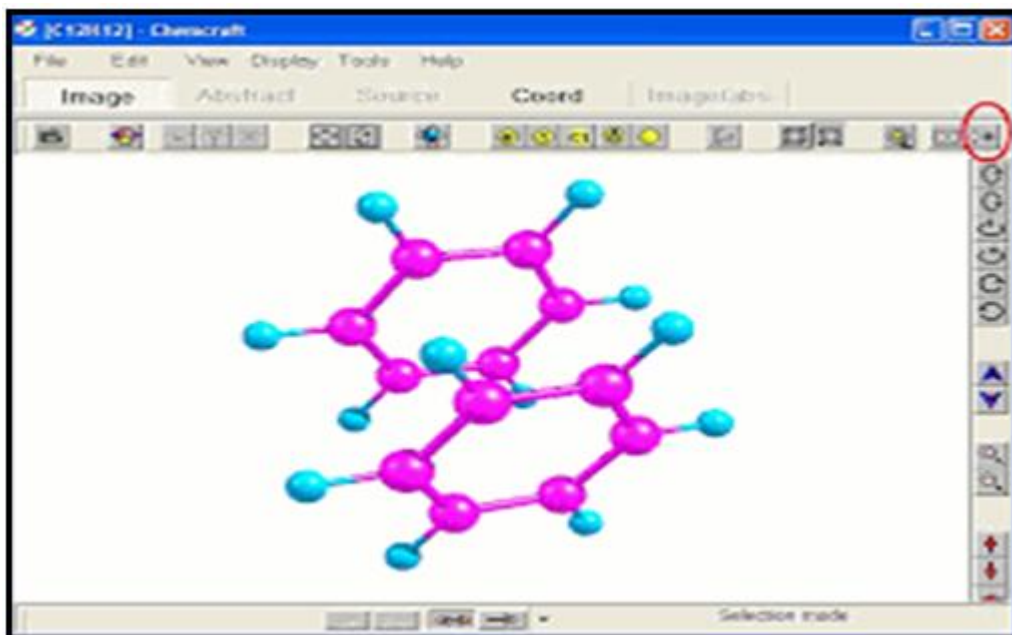
Il existe plusieurs logiciels de la visualisation des différentes structures moléculaires (Les fragments moléculaires, les ligands, les récepteurs, les macromolécules...etc). La plupart de ces logiciels sont gratuits.

- ❖ **GaussView** : (<http://gaussian.com/gaussview5/>).

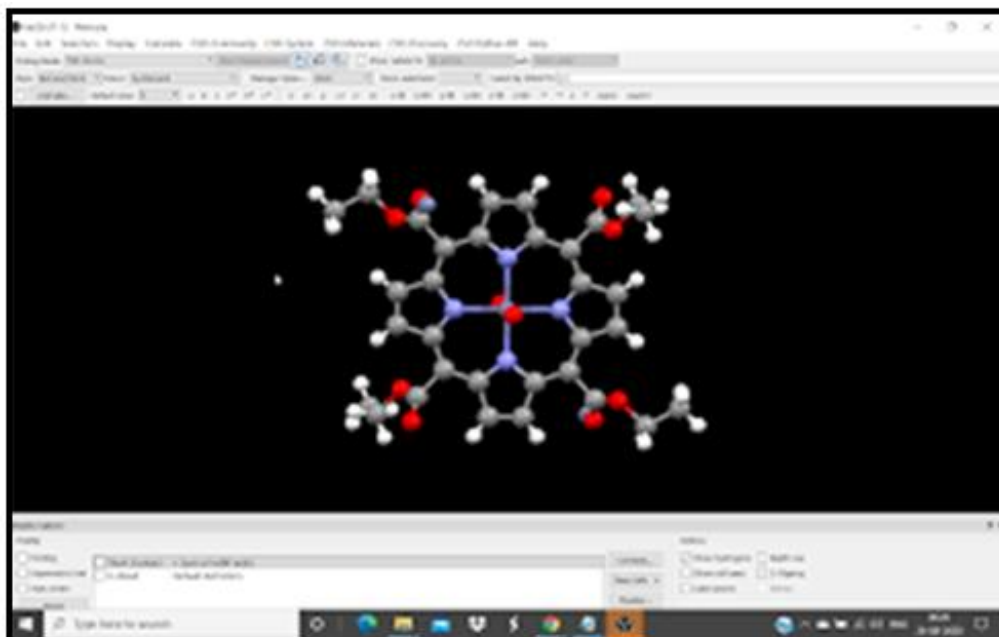




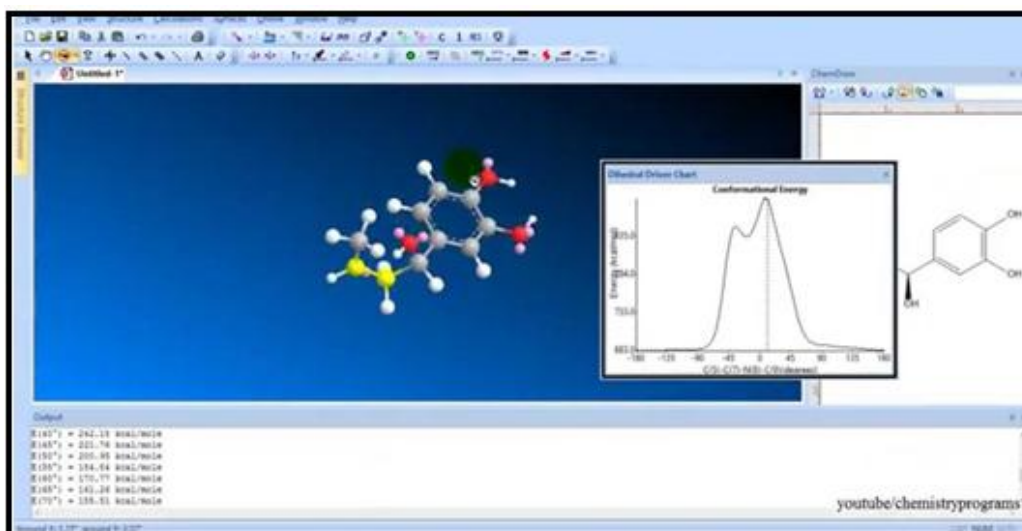
❖ Chemcraft : (<https://www.chemcraftprog.com>).



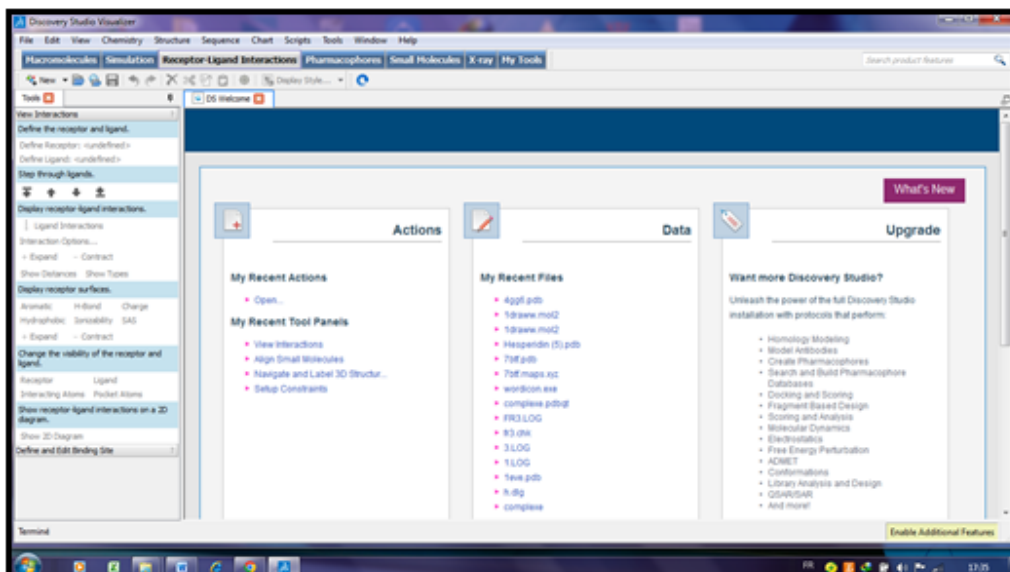
- ❖ Mercury : (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/>).



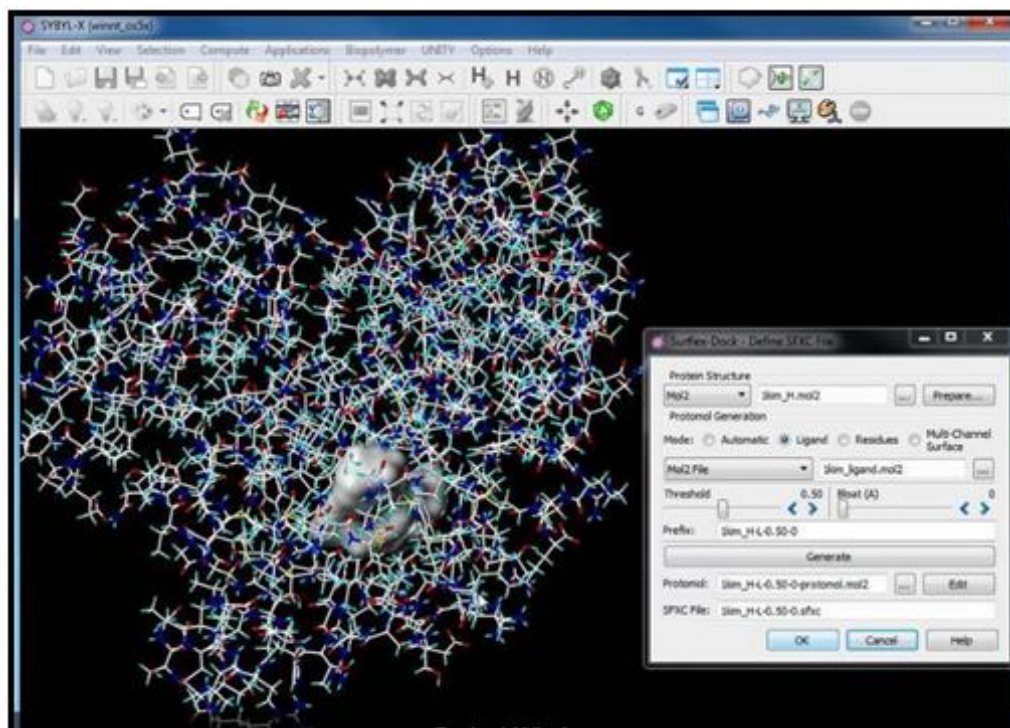
- ❖ Chem3D : (http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemDraw/).



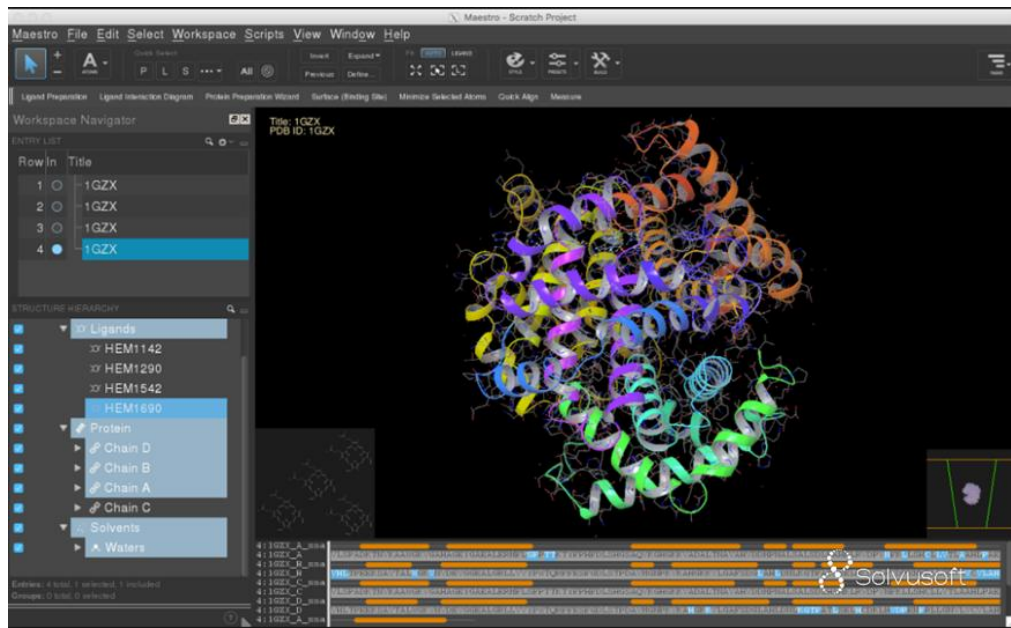
- ❖ **Discovery Studio** : ([http:// accelrys.com/products/discovery-studio/](http://accelrys.com/products/discovery-studio/)).



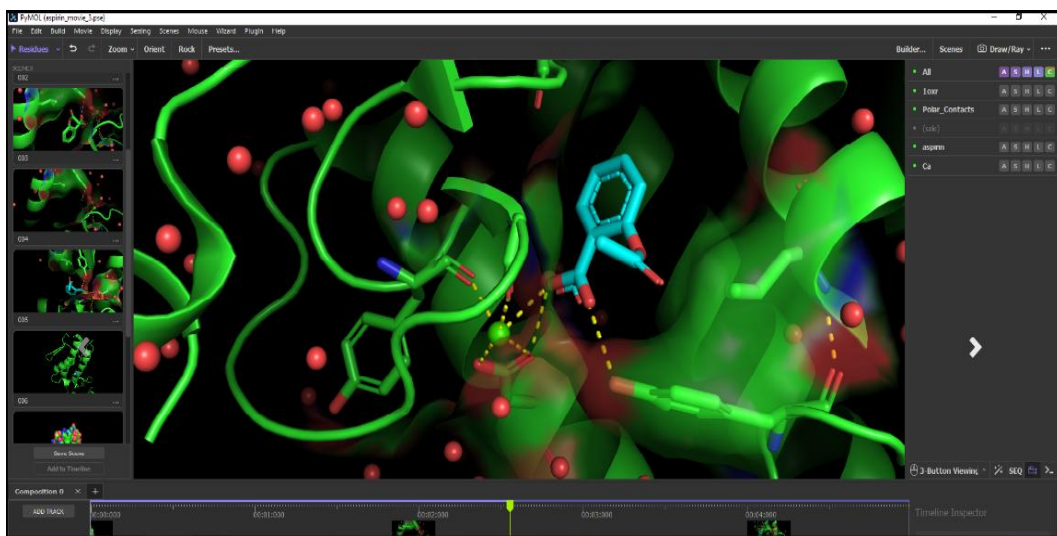
- ❖ **Sybyl** : (<http://tripos.com/index.php>).



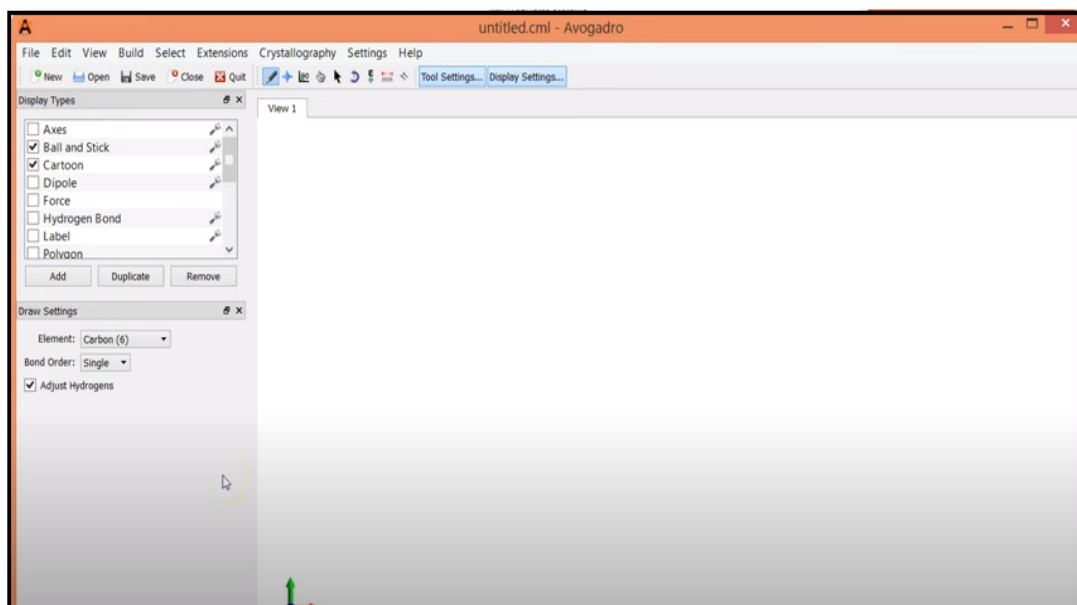
- ❖ **Maestro** : (<http://www.schrodinger.com/Maestro/>).



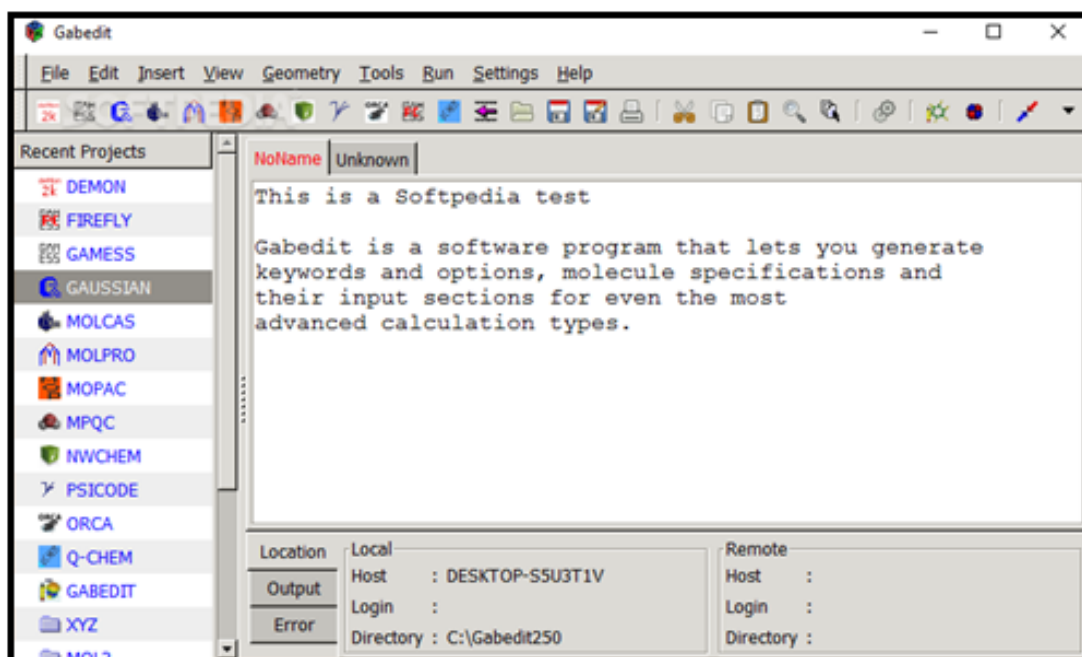
- ❖ **Pymol** : Est un logiciel utilisé pour visualiser les molécules biologiques.



- ❖ **Avogadro** : Est un logiciel de visualisation des molécules en 3D.



- ❖ **Gabedit** : Est un logiciel utilisé pour la prédiction des résultats obtenus par les méthodes : DFT et ab-initio.



- ❖ **RasMol** : Ce logiciel est utilisé pour visualiser les molécules.



- ❖ **Schrödinger** :

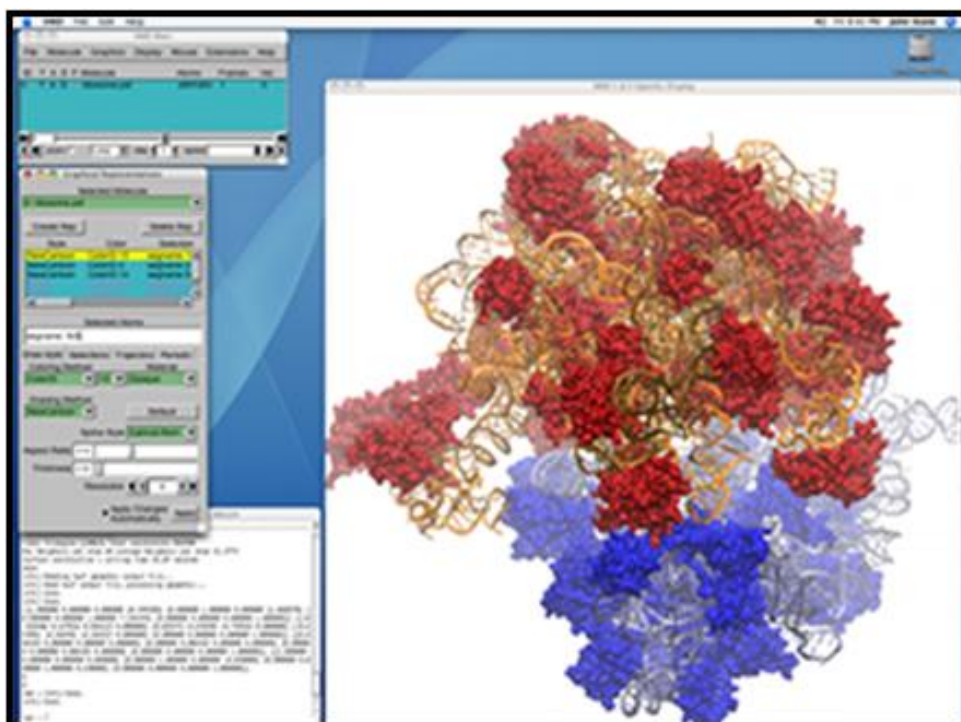


IV.12 Domaines d'utilisation des logiciels de la visualisation moléculaire :

IV.12.1 Dans la dynamique moléculaire :

Le logiciel utilisé dans la dynamique moléculaire est VMD (Visual Molecular Dynamics).

❖ VMD :



IV.12.2 Dans la modélisation moléculaire :

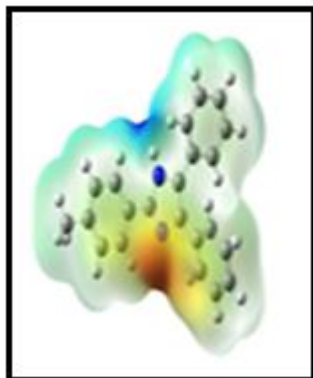
La plupart de ces logiciels qui sont utilisés dans la modélisation moléculaire permettent de déterminer les propriétés physico-chimiques suivantes :

- ❖ Les paramètres géométriques, tels que les longueurs de liaisons, les angles dièdres, les angles de torsion.
- ❖ Les orbitales moléculaires frontières (HOMO et LUMO).
- ❖ Les propriétés énergétiques, tels que le gap énergétiques, l'affinité électronique, le potentiel électrostatique, les énergies des orbitales moléculaires frontières.
- ❖ Les paramètres thermodynamiques, tels que l'énergie libre de Gibbs, l'enthalpie et l'entropie.
- ❖ L'analyse des descripteurs de la réactivité chimiques.
- ❖ Les profils énergétiques des mécanismes réactionnels (Energie d'activation, les états de transition...etc).
- ❖ Les propriétés topologiques, tels que le type et la nature des liaisons chimiques inter-et intra-moléculaires.
- ❖ Les fréquences de vibration.
- ❖ Les propriétés spectroscopiques (Les spectres IR, UV-Visible, RMN).
- ❖ Les surfaces des potentiels électrostatiques.

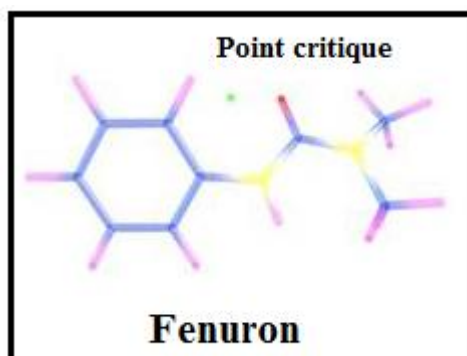
- ❖ L'aromaticité.
- ❖ La densité électronique et les points critiques des liaisons et des cycles aromatiques.

Exemples :

- La surface de potentiel électrostatique d'un dérivé imidazole :



- Les propriétés topologiques de la molécule Fenuron. Le point critique confirme l'existence d'une liaison hydrogène de type O...H :



IV.12.3 Dans l'analyse des interactions moléculaires :

Cette étude consiste à analyser les interactions intra-ou inter-moléculaires de type :

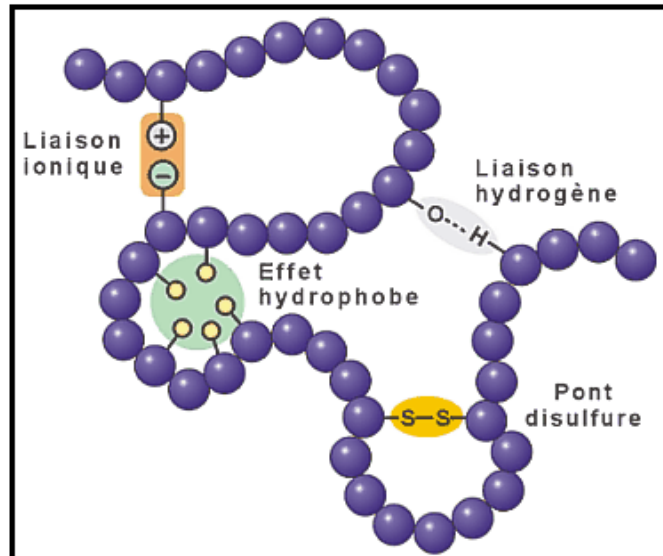
- ❖ Protéine-protéine.
- ❖ Protéine-ADN.
- ❖ Protéine-ARN.
- ❖ Les interactions de VDR Waals.
- ❖ Les liaisons hydrogènes.

Exemples :

- Les interactions Protéine-ADN :



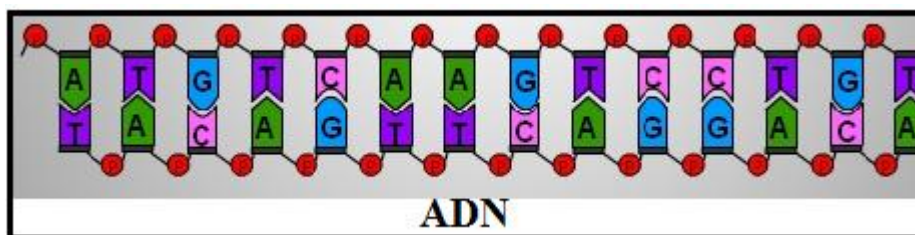
➤ Les interactions de VDR Wals : Liaison hydrogène, Interaction électrostatique...etc.



IV.12.4 Dans la conception des séquences :

Les outils informatiques permettent la conception rationnelle de séquences d'ADN et de protéines.

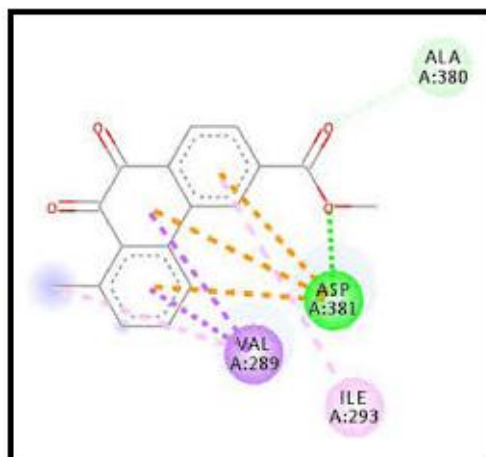
Exemple :



IV.12.5 Dans l'amarrage des protéines :

Il existe des logiciels qui permettent d'analyser et d'interpréter les affinités de liaison potentielles, les énergies...etc.

Exemple :



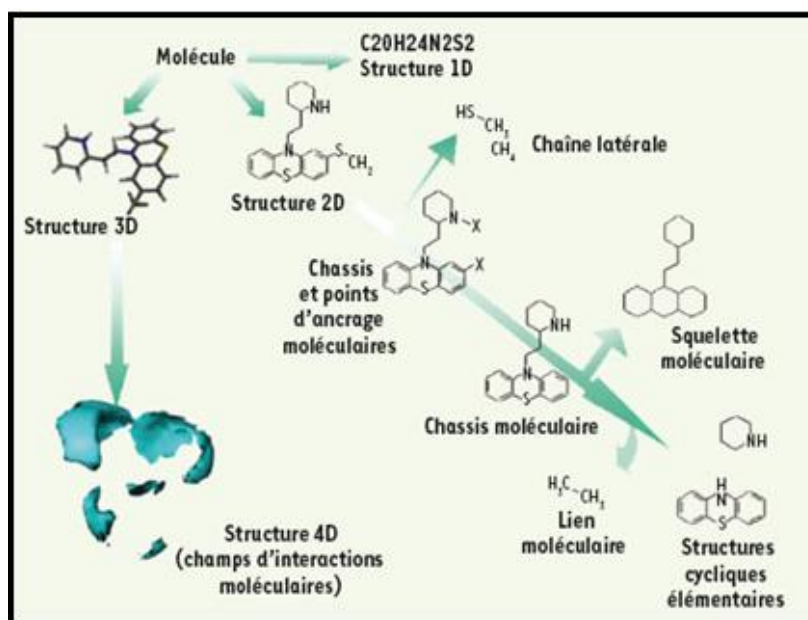
IV.12.6 Dans la catalyse :

Ces logiciels permettent de concevoir de nouvelles enzymes et catalyseurs et de faire les modifications nécessaires dans les sites actifs.

IV.12.7 Dans le criblage virtuel :

Le criblage virtuel est basé sur la connaissance des structures 3D de la cible et les molécules à évaluer dans le site actif. Dans cette méthode, on va déterminer les propriétés biologiques et certaines activités biologiques des composés bio-actifs.

Exemple :

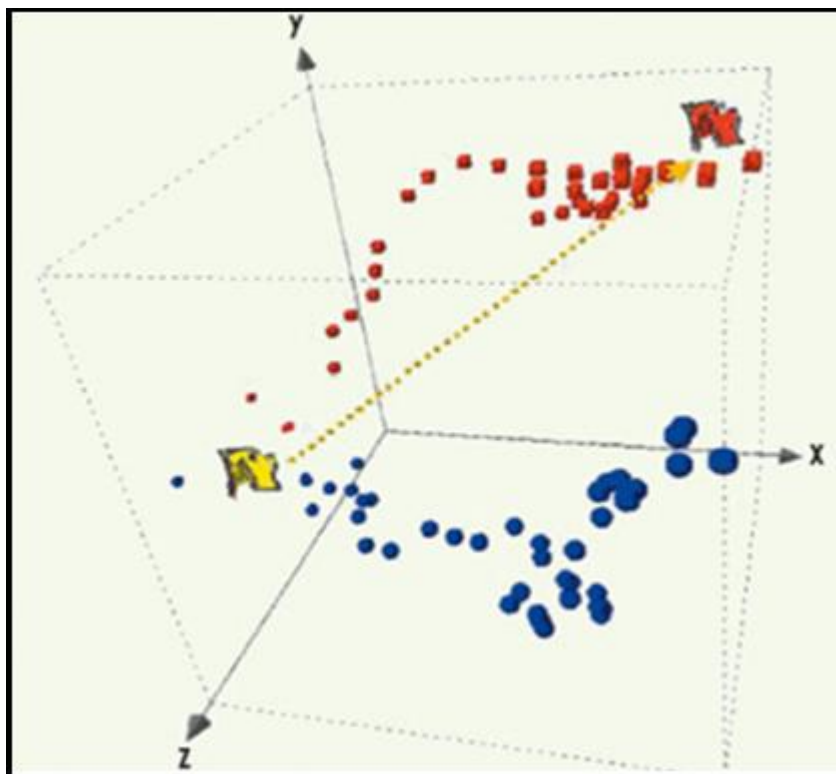


IV.12.8 Dans la pharmaco-graphie :

Les logiciels pharmaco-graphiques permettent de donner des informations chimiques de quelques propriétés biologiques, pharmacologiques par l'utilisation des méthodes *in silico*.

Il existe plusieurs logiciels pharmaco-graphique tels que : GraphPad Prism, PharmaX...etc.

Exemple :



Applications :

1. A partir de ces molécules :

Gliadin, sulfamethoxazole, Candesartan, Losartan, valsartan, Sulfamethazine, Griseofulvin, Pazopanib, Ribavirin, Tipranavir

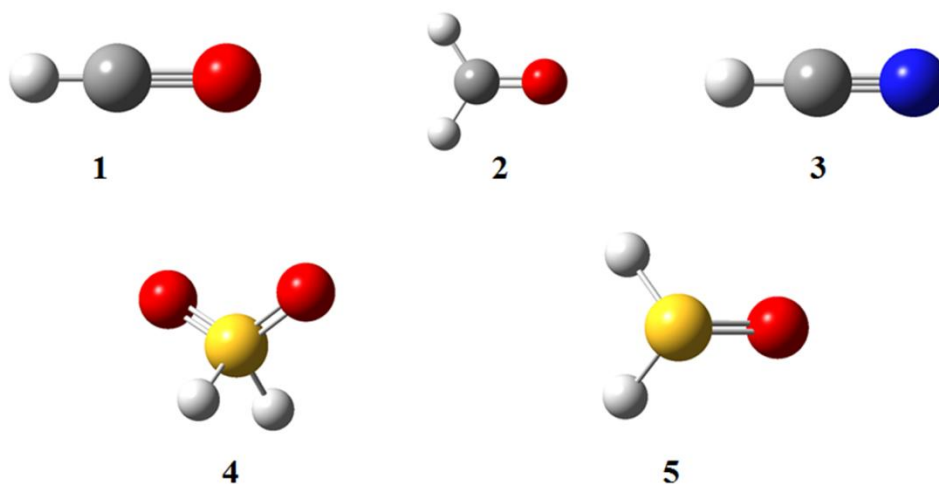
1.1 Donner les structures de la protéine avec le ligand ainsi que le nombre des ligands.

1.2 Donner les structures en 3D de chaque molécule avec le logiciel de visualisation Rastop.

2. En utilisant le programme Gaussian09.

- Pour les molécules ci-dessous, déterminer les propriétés physico-chimiques suivantes :

- ❖ Energie de liaison.
- ❖ Le moment dipolaire.
- ❖ Les orbitales moléculaires.
- ❖ La polarisabilité et l'hyperpolarisabilité.
- ❖ Le potentiel électrostatique.
- ❖ Les fréquences de vibration.
- ❖ Les spectres IR et Raman.
- ❖ Les paramètres thermochimiques.



2.1 Comparer les résultats obtenus.

3. Ouvrir avec Maestro 11.8 la structure cristallographique du récepteur avec le ligand (OLM) (4ZUD.pdb). La structure provienne de la structure cristallographique 4ZUD et est également téléchargeable sur le site <http://www.rcsb.org>

3.1 Faire le redocking moléculaire de ligand référant.

3.2 Déterminer le RMSD entre la solution générée (redocké) par le docking et la référence.

3.3 Utiliser le logiciel de visualisation Chimera pour visualiser les résultats de redocking.

3.4 Analyser ces résultats.

4.1 Représenter et visualiser les molécules suivantes en 2D et 3D : Ethylène, Flurethylène, Propène et Vinyl amine.

4.2 Faire un calcul d'optimisation de chaque molécule avec la méthode DFT, la fonctionnelle B3LYP et la base /6-31G(d,p).

4.3 Interpréter les résultats obtenus.

4.4 Quel est l'effet de substituant sur chaque molécule ?

Ressources d'aide :

- Les applications industrielles de la bio-informatique, Réalités industrielles, J. P. Vert, Ed. Eska, 2013.
- Introduction à la Bio-Informatique, N. El-Mabrouk, DIRO, Université de Montréal, 2013.
- Chimie physique, P. W. Atkins, De Boeck Université, 2000.
- Les molécules en fichier 3D, O. Méjean, Licence Creative Commons CC BY, 2019.
- La modélisation et l'analyse statistique des données expérimentales, A. Billel, Université de Badj Mokhtar – Annaba, 2017.
- Informatique générale – Histoire de l'informatique, G. Hutzler, Université d'Évry – France, 2010.
- Un modèle chimio-informatique pour une synthèse virtuelle, F. Z. Debba, Université de Badj Mokhtar – Annaba, 2010.
- Cours de la Chimie Informatique, D. Rayenne, Université de 08 Mai 1945 Guelma, 2016.
- Graphes et tests pour l'analyse de données expérimentales, M. Bailly-Bechet, Université Claude Bernard –Lyon 1, 2012.
- Une Méthode D'analyse Graphique des Courbes de Croissance, E. Schiffers, R. Vinck, Annales de biologie animale, biochimie, biophysique, 1973.
- Analyse de données expérimentales, T. Denoeux, Université de Technologie de Compiègne-France, 2014.
- Introduction au Système d'Exploitation Linux, B. Boudjemaa, Université de Tiaret, 2010.
- Le Traitement Statistique, F. Zarrouk, Institut Supérieur du Sport et de l'Education Physique de Ksar-Said – Tunisie, 2012.
- Atatistique et Analyse de Données, M. Zerouti, Ecole Nationale Supérieure de Management Pôle Universitaire de Koléâ – Tipaza, 2019.

- Cours de Systèmes d'Exploitation, H. Bourzoufi, Université de Valenciennes–ISTV, 2017.
- Computational Chemistry, D. Young, Wiley – Interscience, Appendix A.2.4, Gaussian, 2001.
- Eléments de Chimie Quantique, J. L. Rivail, InterEditions / CNRS Editions, 1994.
- Molecular Visualization, Structural bioinformatics, S. Bottomley & Helmerhorst, 2nd edition, Hoboken: John Wiley & Sons, 2009.
- Students Understanding of Molecular Structure Representations, V. Ferk, M. Vrtacnik, A. Blejec & A. Gril, International Journal of Science Education, 2003.
- Combining Ligand-and Structure–Based Methods in Drug Design Projects, O. Sperandio, M. A. Miteva, B. O. Villoutreix, Curr Comput Aid Drug Design, 2008.