

Exploiter et valoriser les savoirs oubliés en chimie expérimentale

dimanche 15 septembre 2013

Frank Hoonakker

- plus de **50 000** entreprises
- plus de **2 000** universités
- **600 000** chimistes utilisateurs
 - 300 réactions / chimiste / an – 180 000 000 réactions / an
 - 5,4 milliards € de dépenses de consommables

50% > réactions infructueuses > **70%**

90 M > réactions infructueuses > **126 M**

3 M^{ard} € > € investis à perte > **4 M^{ard} €**

– **126 000 000** de «lost chemistry» (réactions **NON** accessibles)

Système d'information



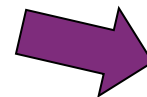
SciFinder®



reaxys™

Innovation from CrossFire Beilstein

Recherche



Réactifs

Aldrich (\$ 1 798M),
Johnson Matthey (€ 9 105 M)...



Achat



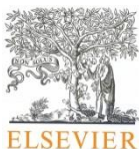
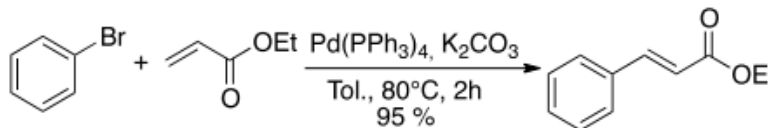
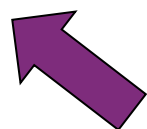
Archivage

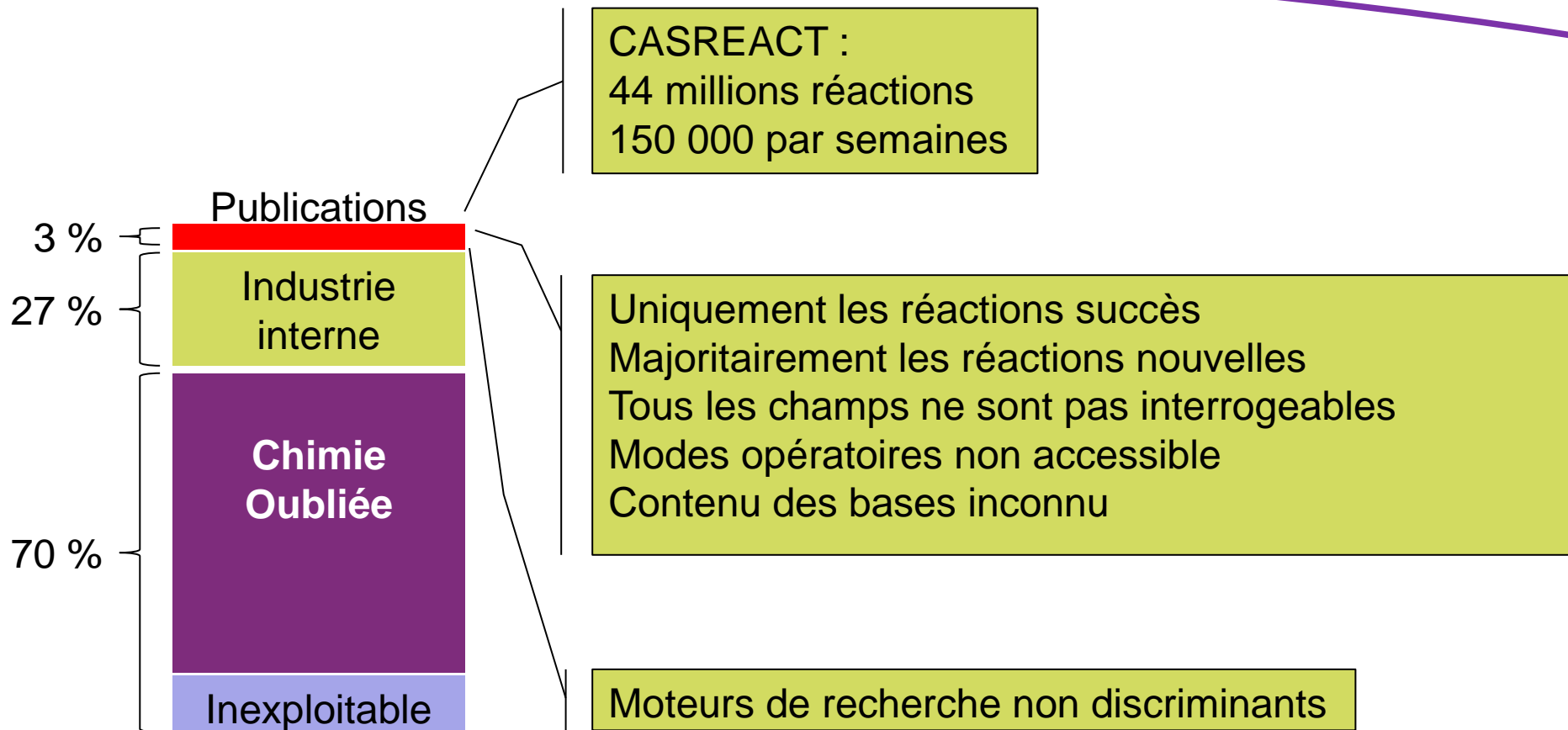


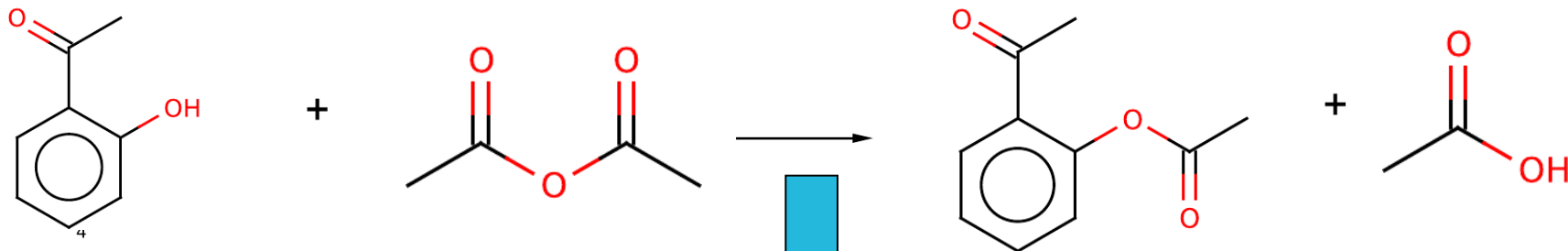
Données Publications

Recherche

Publication

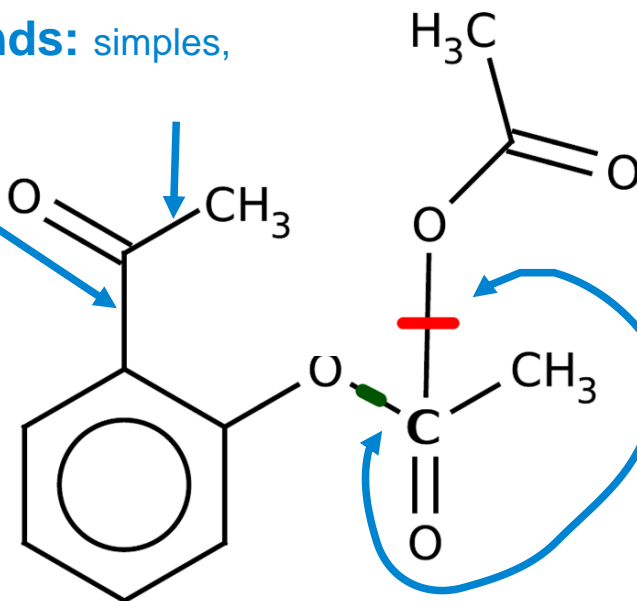




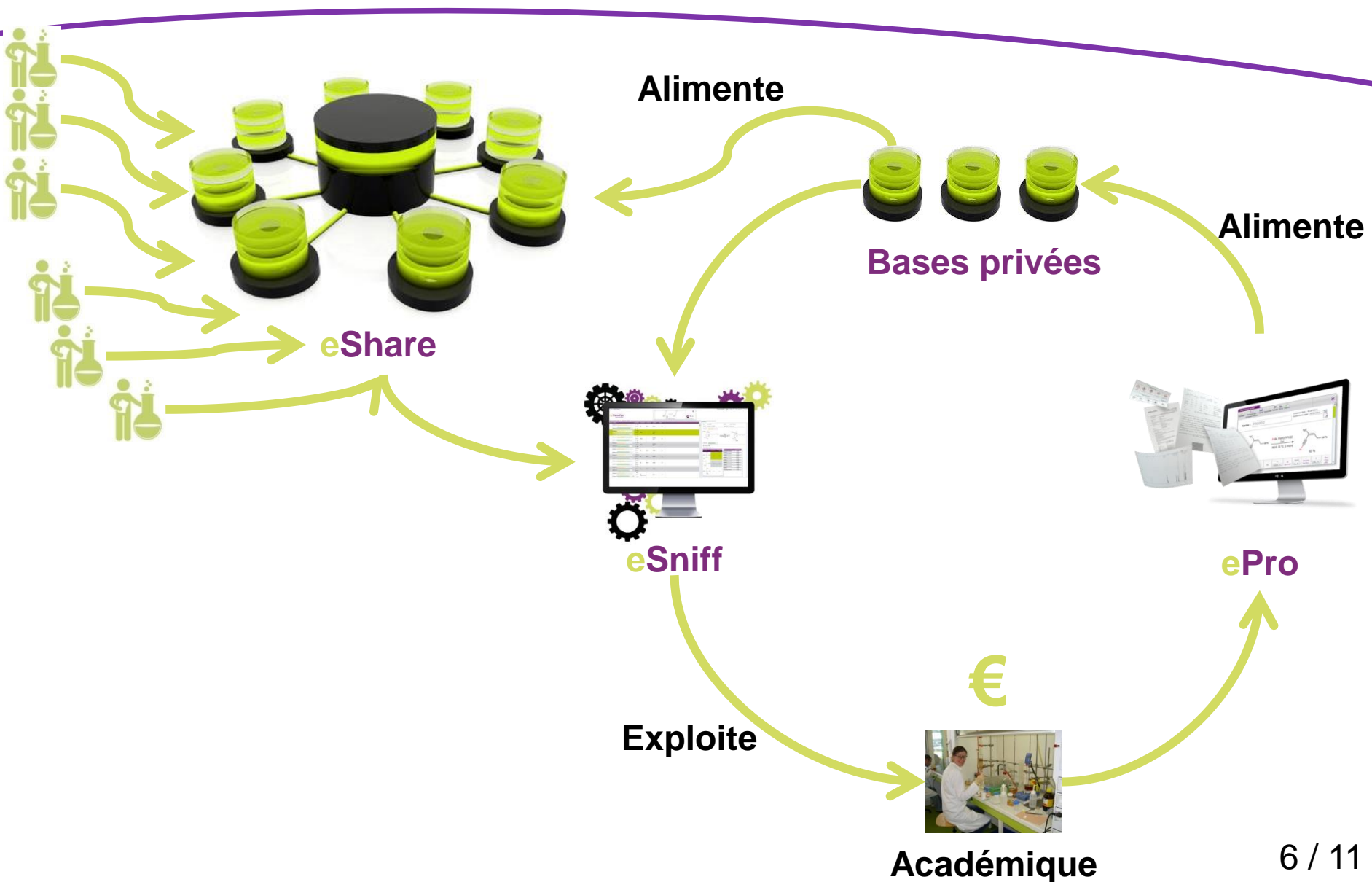


Transformation of a reaction into
CGR

Conventional bonds: simples, doubles, aromatics ...



Dynamicals bonds:
Create a simple, break a simple, ...





Augmenter la taille de la base

Numérisation du patrimoine



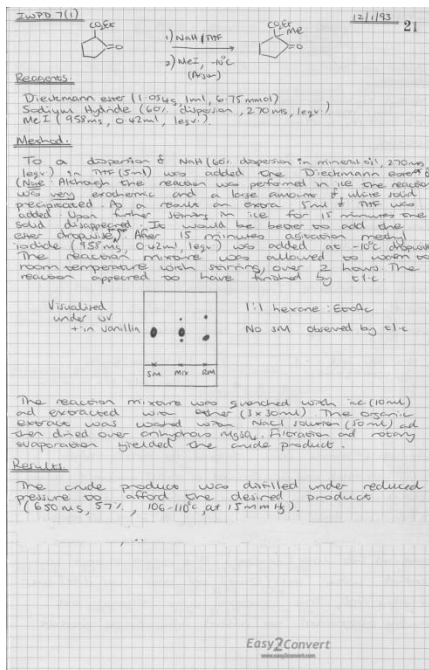
eShare



Brevets

Thèses

Supplementary materials



Projet pôle : **ECLEIR**

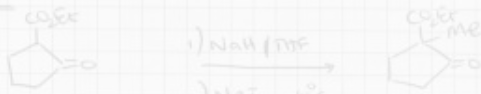
Environnement de travail
Collaboratif pour
L'Exploitation Intelligente
de la Réactivité chimique

Patrimoine en France :
15 millions de réactions
sur les **20 dernières années.**

ZwPD 7(1)

12/1/93

21



Reagents:

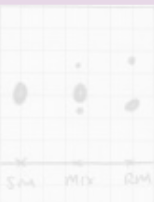
(A₂₀)

Dieckmann ester (1.054g, 1ml, 6.75 mmol)
Sodium Hydride (60% dispersion, 270mg, 1equiv.)
MeI (958mg, 0.42ml, 1equiv.)

Method:

To a dispersion of NaH (60% dispersion in mineral oil, 270mg, 1equiv.) in TMF (5ml) was added the Dieckmann ester (1.054g, 6.75 mmol). (Note: Although the reaction was performed in ice the reaction was very exothermic and a large amount of white solid precipitated. As a result an extra 5ml of TMF was added. Upon later stirring in ice for 15 minutes the solid disappeared. It would be better to add the ester dropwise.) After 15 minutes acetic anhydride (958mg, 0.42ml, 1equiv.) was added at -10°C dropwise. The reaction mixture was allowed to warm to room temperature with stirring, over 2 hours. The reaction appeared to have finished by TLC.

Visualized
under UV
+ in vanillin



1:1 hexane:EtOAc

No SM observed by TLC

The reaction mixture was quenched with ac (10ml) and extracted with ether (3x30ml). The organic extract was washed with NaCl solution (50ml) and dried over CaH₂. Purification of mixture

Schéma de la réaction

Tableaux d'engagement

Protocole de réaction

Composition du milieu

Protocole d'arrêt et de

Results:

The crude product was distilled under reduced pressure to afford the desired product (650 mg, 57%, 106-110°C, at 15 mm Hg).

- Prétraitement :
 - Scan haute qualité
 - Suppression du quadrillage
 - suppression du bruit de type poivre et sel créé par la numérisation.
 - Suppression des bordures autour des documents.
- Segmentation du document (RLSA)
 - extraire les composantes connexes.
 - Règles de discrimination texte / graphique
- Spotting
 - Reconnaissance de mots, phrases, tableaux

- Vitesse de saisie manuelle : 8 / heure / homme
- Durée estimée (15 M de réactions) : 234 375 jours / hommes

- Objectif de la saisie semi automatique : x2 ou x3
- Durée estimée : 100 000 à 80 000 jours / homme,

Pour saisir le patrimoine d'un labo (200 cahiers sur 20 ans):
1 mois pour une équipe de 8 personnes.

Merci de votre attention

www.enovalys.com