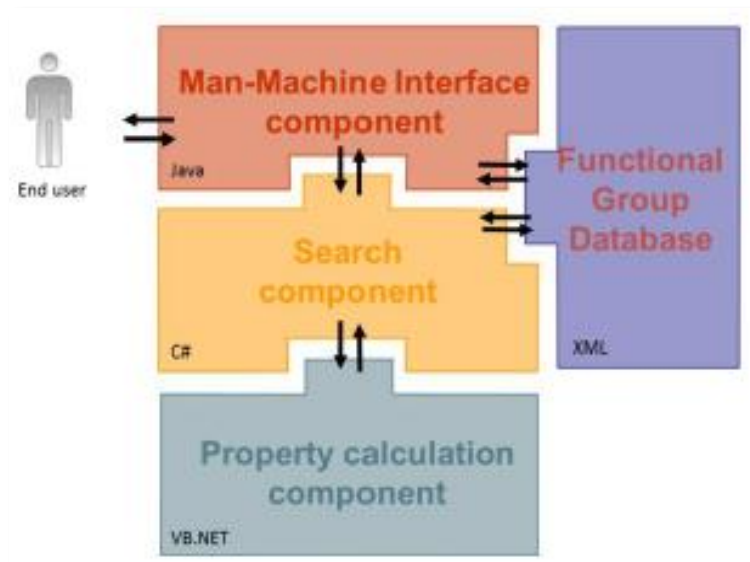


IBSS : logiciel de formulation moléculaire inverse

Le « Computer Aided Molecular Design » ou formulation inverse consiste en la recherche assistée par ordinateur de molécules satisfaisant un ensemble de contraintes. Ce concept est à l'opposé des méthodes usuelles de recherche par « essais et erreur » dans lesquelles les chimistes synthétisent les molécules puis testent leurs propriétés.

DESCRIPTION*

- Outil de formulation inverse mettant en œuvre un algorithme génétique :
 - Formulation de molécules (substitution de solvant, moins toxique, non inflammable...)
 - Estimation de propriétés physico-chimiques multiples
 - Screening de molécules et de groupes chimiques pouvant satisfaire un cahier des charges
- Offre :
 - Sous forme Logiciel (avec Interface Homme-Machine)
 - Sous forme Prestation (via le laboratoire)



Crédit photo : ©V. Gerbaud.

SPÉCIFICATIONS TECHNIQUES

Type d'algorithme d'optimisation	Algorithme génétique → exploration des structures, liste de candidats classés selon leur performance
Données Entrée	- Propriétés cibles (propriétés physico-chimiques et/ou impact environnemental) - Choix de groupes fonctionnels et/ou synthons imposés
Données Sortie	Molécules ou mélange satisfaisant les propriétés cibles, indice de performance

*Technologie soumise à licence.
TTT_123. Document non contractuel. Tous droits réservés. Juin 2017.

AVANTAGES CONCURRENTIELS

- Seul logiciel permettant d'imposer des synthons biosourcés et d'évaluer l'intérêt de les fonctionnaliser
- Détermination du mélange le plus adapté
- Base de données complète des groupes fonctionnels
- Architecture flexible : ajout de nouvelles propriétés ou de synthons propriétaires

APPLICATIONS

- Industrie chimique :
 - Agrochimie
 - Solvants (peinture, encre, résine, extraits...)
 - Réfrigérants...
- Industrie Pharmaceutique

PROPRIÉTÉ INTELLECTUELLE

- Droit d'auteur
- Dépôt APP

ÉTAPES DE DÉVELOPPEMENT

- Validation de la technologie en environnement réel

1 2 3 4 5 6 7 8 9

LABORATOIRE

- Département Procédés et Systèmes Industriels



CONTACT

T. +33 (0)5 62 25 50 60
greentech@toulouse-tech-transfer.com
www.toulouse-tech-transfer.com