

Open Campus MAIA
Financement d'un contrat doctoral
1^{er} octobre 2024

Synthèse de Nouveaux Dérivés de Cyclodextrines Assistée par l'Intelligence Artificielle

Contexte

Le projet MAIA ("Maîtrise des Applications de l'IA") PIA Excellence, vise à développer des solutions de recherche originales et génériques pour faire avancer l'explicabilité formelle et l'acceptabilité sociétale de l'IA, avec un focus sur trois domaines phares, la santé, la chimie et l'environnement, de l'alliance A2U (Université d'Artois, UPJV et ULCO) ainsi que pour la région Hauts-de-France (HdF).

Résumé en français :

Le LG2A de l'UPJV et l'UCCS de l'UArtois voient dans le développement de l'IA, en collaboration étroite avec le CRIL, une opportunité pour améliorer le criblage des molécules biosourcées d'intérêt, optimiser leur voie de synthèse et prédire leurs propriétés. Cette approche doit permettre de passer d'un criblage purement chimique vers un criblage informatique, en se basant sur l'analyse d'un maximum de données expérimentales afin d'optimiser le design de nouvelles molécules (les cyclodextrines (CDs) modifiées), les paramètres des procédés de synthèses ou de prévoir la régiosélectivité des synthèses. Ceci nécessite la création de jeux de données expérimentales en synthèse et en caractérisation pour valider les prédictions. L'objectif est d'accélérer non seulement l'accès de nouveaux dérivés de CDs plus performants mais aussi à des procédés de synthèse moins énergivores et plus durables. Le résultat de ce travail sera un compromis entre la qualité de la prédiction que l'on peut obtenir à l'aide de techniques performantes (faiblement explicables pour l'instant ; apprentissage profond) et qui demandent beaucoup de données et des approches plus traditionnelles, nécessitant moins de données, explicables mais quelques fois moins performantes.

Toutes les données expérimentales de synthèses et de caractérisations physico-chimiques obtenues sur des CDs modifiées seront compilées, traitées et transformées dans un format « computer friendly » afin d'être intégrées dans une database relative à la prédiction de structures de CDs modifiées. Finalement, la « preuve de concept » sera donnée en évaluant le rôle joué par ces nouvelles CDs lors de processus de catalyse.

Profil du candidat

Master 2/ingénieur en chimie, avec une expérience en chimie organique ou chimie supramoléculaire. - forte motivation à la fois pour la synthèse organique et la caractérisation physico-chimique des molécules (RMN et SM). Compétences: - bonnes connaissances chimie moléculaire. - maîtrise des techniques de caractérisation des molécules organiques.

Financement : ANR PIA4 « Open Camus MAIA » pour 3 ans

Date de prise de fonction : 1^{er} octobre 2024

Laboratoires d'accueil :

LG2A (Laboratoire de Glycochimie et des Agro ressources d'Amiens) UR7378, UPJV

UCCS (Unité de Catalyse et Chimie du Solide) UMR8181, UArtois
CRIL (Centre de Recherche en Informatique de Lens) UMR8188, UArtois

Directeurs : Pr Florence Djedaini-Pilard, Pr, LG2A, UPJV florence.pilard@u-picardie.fr et Pr Sébastien Tilloy, sebastien.tilloy@univ-artois.fr, UCCS UArtois

Candidature : transmettre lettre de motivation, CV, notes et diplômes, lettres de recommandation à florence.pilard@u-picardie.fr et sebastien.tilloy@univ-artois.fr

.