



# DE LA CHIMIE... OUI, MAIS DERRIÈRE UN ORDI !

+ CHIMIE



**THIBAUT MINERVINI** est doctorant en chimie au laboratoire Chrono-Environnement au sein d'une petite équipe. Ils ont pour objectifs de donner des bases théoriques à des phénomènes physico-chimiques d'intérêt biologique d'explorer et d'expliquer des événements beaucoup trop rapides et/ou masqués pour être étudiés avec la chimie « classique ». En complément de l'expérience et des études théoriques à grande échelle (mécanique moléculaire) Thibault observe sur son ordinateur les réactions chimiques à l'échelle des atomes, notamment entre des médicaments anticancéreux et des protéines présentes dans l'organisme.

« Les molécules dansent à l'intérieur du corps, un ballet d'une complexité effroyable que la chimie numérique est capable de déchiffrer. »

**Thibault Minervini**

La chimie numérique est une discipline dédiée aux expériences dites « in-silico » (sur ordinateur) à l'opposé des expériences in-vivo (à l'intérieur du corps) et des expériences in-vitro (dans des éprouvettes, par exemple). La chimie numérique permet d'observer des phénomènes soit trop petits, soit trop grands pour être étudiés à l'œil nu, ou même à l'aide des méthodes d'analyse les plus perfectionnées.

La thèse de Thibault porte sur des phénomènes extrêmement petits : que se passe-t-il quand deux molécules se rencontrent ? Quelle est la structure du produit de cette réaction ? Quelle est la quantité d'énergie nécessaire pour que la réaction puisse se dérouler spontanément ? Cette quantité d'énergie peut-elle être trouvée dans le corps ? Si oui, la réaction sera-t-elle suffisamment rapide ?

Toutes ces questions méritent d'être posées, en particulier lorsque la réaction en question concerne un médicament anticancéreux et une protéine s'interposant entre le médicament et sa cible véritable, et que cette réaction peut entraîner des effets secondaires importants pour le patient.

Les réponses à ces questions peuvent permettre, à long terme, de donner des indices pour la formulation d'une prochaine génération de médicaments par les médecins.

---

## LES OBJECTIFS

- + Simuler des réactions chimiques se déroulant dans le corps humain.
- + Éclaircir des interactions entre protéines et métaux.
- + Étudier des mécanismes nuisant à l'efficacité de traitements médicamenteux.