

## LES MARDIS DE LA CHIMIE

**CONFERENCE TOUT PUBLIC**



**Etienne Derat**  
(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)



## SIMULATION DE LA RÉACTIVITÉ DANS LES SYSTÈMES MOLÉCULAIRES DE GRANDE TAILLE

**14 Février 2023**

**à 16h45**

**Collation à 16h30**

**UFR de Chimie**

**Tour 32-42  
Salle 101**

**Résumé** - Simuler (et comprendre !) la réactivité dans les systèmes de grande taille représente un défi à plusieurs niveaux. Le plus évident est celui lié aux temps de calcul qui croissent approximativement au cube de la taille du système. Plus subtil est l'explosion conformationnelle qui démultiplie elle aussi les calculs nécessaires à une bonne description du système. Enfin, il est aussi nécessaire de garder une bonne qualité dans les descriptions des effets électroniques car ceux-ci ne sont pas nécessairement plus simples dans les grands systèmes.

Je montrerai au travers de l'étude de deux systèmes comment il est néanmoins possible d'étudier la réactivité des systèmes de grande taille. Dans un premier temps, je décrirai comment il est possible de comprendre la réactivité des cyclodextrines modifiées et quelles sont les limites actuelles. Dans un second temps, j'exposerai pourquoi une enzyme, l'acétylcholinestérase, qui effectue une simple réaction de transestérification présente en fait une grande complexité.

**Biographie** - J'ai étudié la chimie à Amiens et Reims et j'ai poursuivi par un doctorat à Reims sous la direction du Pr Stéphane Humbel, en travaillant sur la chimie organométallique théorique de 2001 à 2004. Puis, j'ai effectué un séjour postdoctoral avec le professeur Sason Shaik à Jérusalem portant sur l'étude par QM/MM de la réactivité de diverses métalloenzymes. En 2006, je suis nommé maître de conférences dans le groupe du Pr Max Malacria (IPCM-UPMC), dirigé depuis par le Pr. Louis Fensterbank (IPCM-SU)... [En savoir plus](#)

[Capturing the Monomeric \(L\) CuH in NHC-Capped Cyclodextrin: Cavity-Controlled Chemoselective Hydrosilylation of  \$\alpha\$ ,  \$\beta\$ -Unsaturated Ketones.](#)

Xu G., Leloux S., Zhang P., Meijide Suárez J., Zhang Y., Derat E., Ménand M., Bistri-Aslanoff O.; Roland S. Leysens T.

*Angewandte Chemie International Edition* **2020**, *59*, 7591–7597.



[\$\beta\$ -Cyclodextrin–NHC–Gold \(I\) Complex \( \$\beta\$ -ICyD\) AuCl: A Chiral Nanoreactor for Enantioselective and Substrate-Selective Alkoxy cyclization Reactions.](#)

Tugny C., del Rio N., Koohgard M., Vanthuyn N., Lesage D., Bijouard K., Zhang P., Mejjide Suárez J.; Roland S., Derat E.  
*ACS Catalysis* **2020**, *10*, 5964–5972.

[Artificial Chiral Metallo-Pockets Including a Single Metal Serving as Structural Probe and Catalytic Center.](#)

Zhang P., Tugny C., Suárez J. M., Guitet M., Derat E., Vanthuyn N., Zhang Y., Bistri O., Mouriès-Mansuy V., Ménand M.  
*Chem* **2017**, *3*, 174–191.

[Cyclodextrin Cavity-Induced Mechanistic Switch in Copper-Catalyzed Hydroboration.](#)

Zhang P., Mejjide Suárez J., Driant T., Derat E., Zhang Y.; Ménand M.; Roland S., Sollogoub M.  
*Angewandte Chemie International Edition* **2017**, *56*, 10961–10965.

[Solid-State Hierarchical Cyclodextrin-Based Supramolecular Polymer Constructed by Primary, Secondary, and Tertiary Azido Interactions.](#)

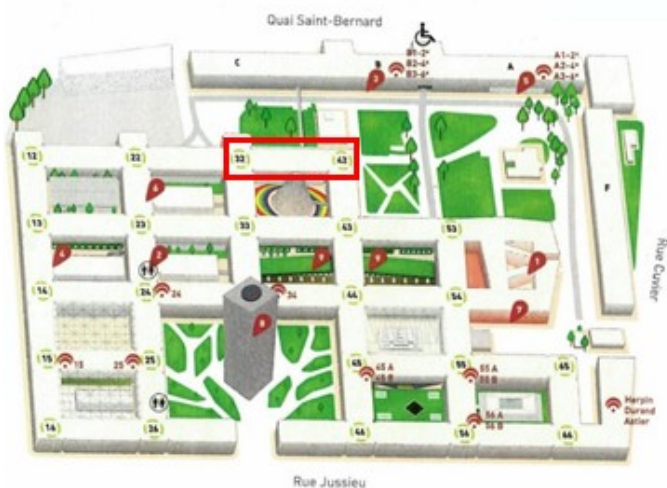
Ménand M., Adam de Beaumais S., Chamoreau L.-M., Derat E., Blanchard S., Zhang Y., Bouteiller L., Sollogoub, M.  
*Angewandte Chemie International Edition* **2014**, *53*, 7238–7242.

[On the Influence of the Protonation States of Active Site Residues on AChE Reactivation: A QM/MM Approach.](#)

Driant T., Nachon F., Ollivier C., Renard P.-Y., Derat, E.  
*ChemBioChem* **2017**, *18*, 666–675.

[Fixation of the Two Tabun Isomers in Acetylcholinesterase: A QM/MM Study.](#)

Kwasnieski O, Verdier L.; Malacria, M., Derat, E.  
*The Journal of Physical Chemistry B* **2009**, *113*, 10001–10007.



[Plan campus](#)

*Les mardis de la chimie*

Contact : [Nicolas.Sisourat@sorbonne-universite.fr](mailto:Nicolas.Sisourat@sorbonne-universite.fr)

Conception : [Fernande.sarrazin@sorbonne-universite.fr](mailto:Fernande.sarrazin@sorbonne-universite.fr)