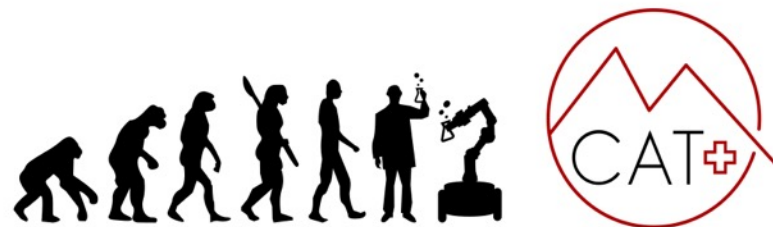


Catalysis Hub - Swiss CAT+



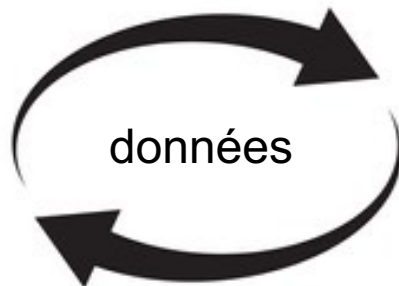
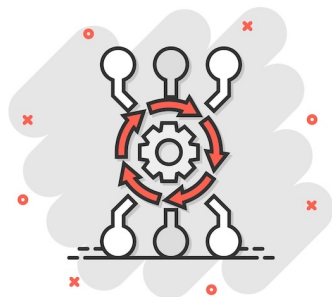
Chimie robotisée et pilotée par les données

Pascal Miéville
Directeur exécutif West Hub
20 novembre 2024

Rencontre
5à7
Enseignant·es des
gymnases - EPFL

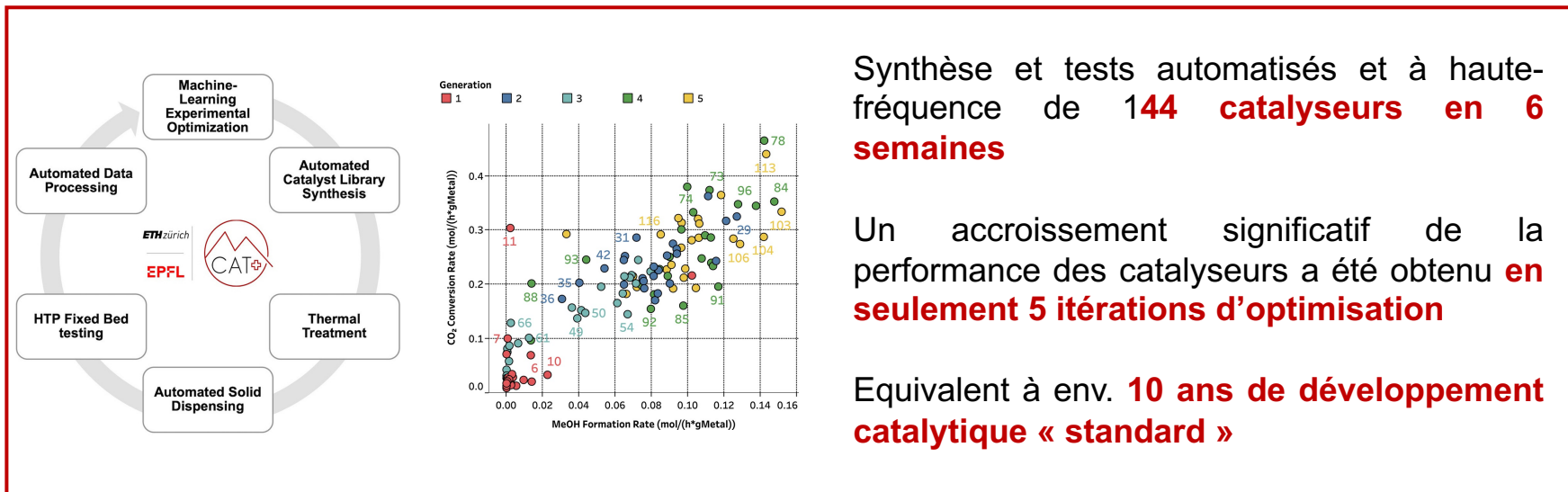
La chimie digitalisée – une troisième voie

Où tout se concentre sur les données !



La chimie digitalisée – une troisième voie

Qui peut donner des résultats impressionnants



Synthèse et tests automatisés et à haute-fréquence de **144 catalyseurs en 6 semaines**

Un accroissement significatif de la performance des catalyseurs a été obtenu **en seulement 5 itérations d'optimisation**

Equivalent à env. **10 ans de développement catalytique « standard »**

Grand potentiel pour :

- Nouveaux médicaments
- Nouveaux matériaux
- Nouvelles voies de synthèse

Ramirez et al., Chem Catalysis 4, 100888, February 15, 2024

La chimie digitalisée – une troisième voie

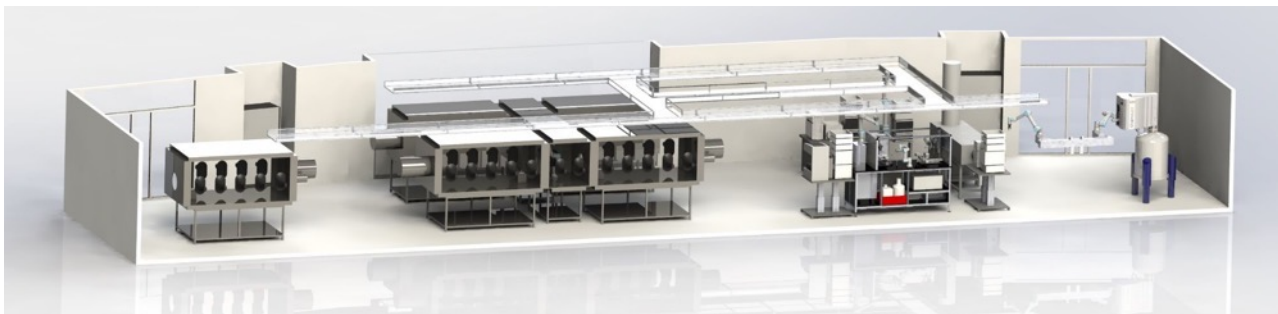
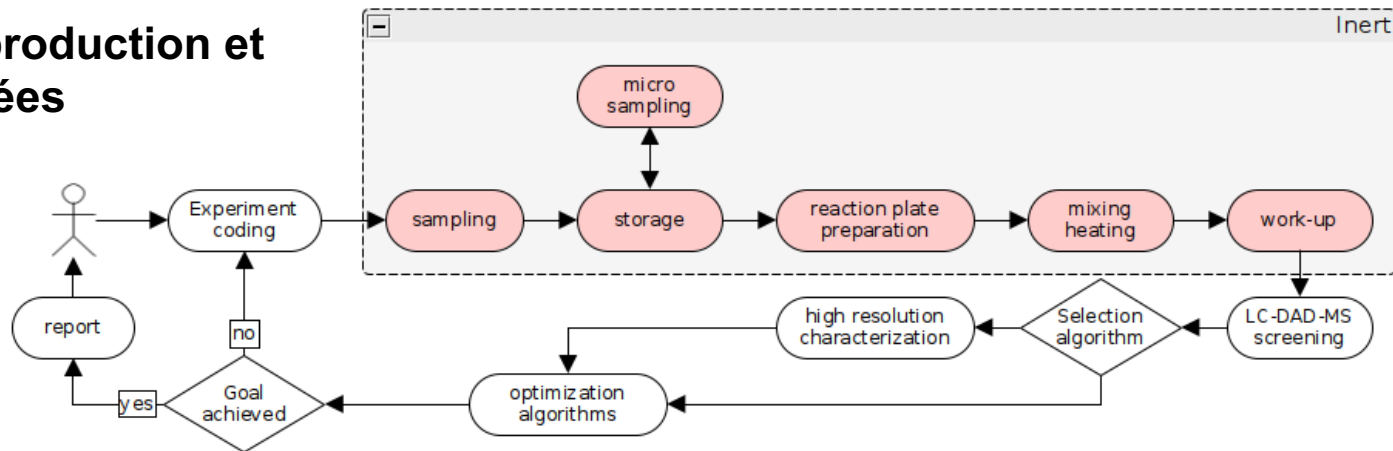
Mais qui peut produire beaucoup de déchets



- GIGO
- Hallucinations
- Corrélations fallacieuses
- Consommation d'énergie
- Consommation de matière

Il est donc essentiel de maîtriser autant que possible la chaîne de données.

Structure de production et test des données

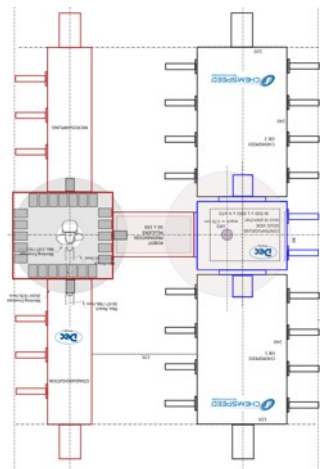


P. Laveille*, P. Miéville* et al, *Chimia* 2023, 77, 154, DOI: 10.2533/chimia.2023.154

P. Miéville, F. de Nanteuil, *Modern Automated Organic Synthesis Comprehensive Organic Synthesis 3rd Edition*, 2024, Elsevier

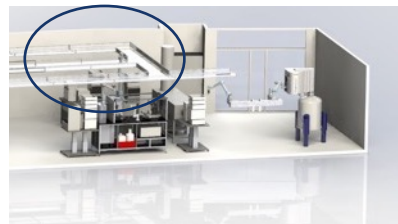
Workflow opérationnel (dans la vraie vie)

La station de prélèvement de solides et de synthèse



Workflow opérationnel (dans la vraie vie)

Station de contrôle des réactions (screening)

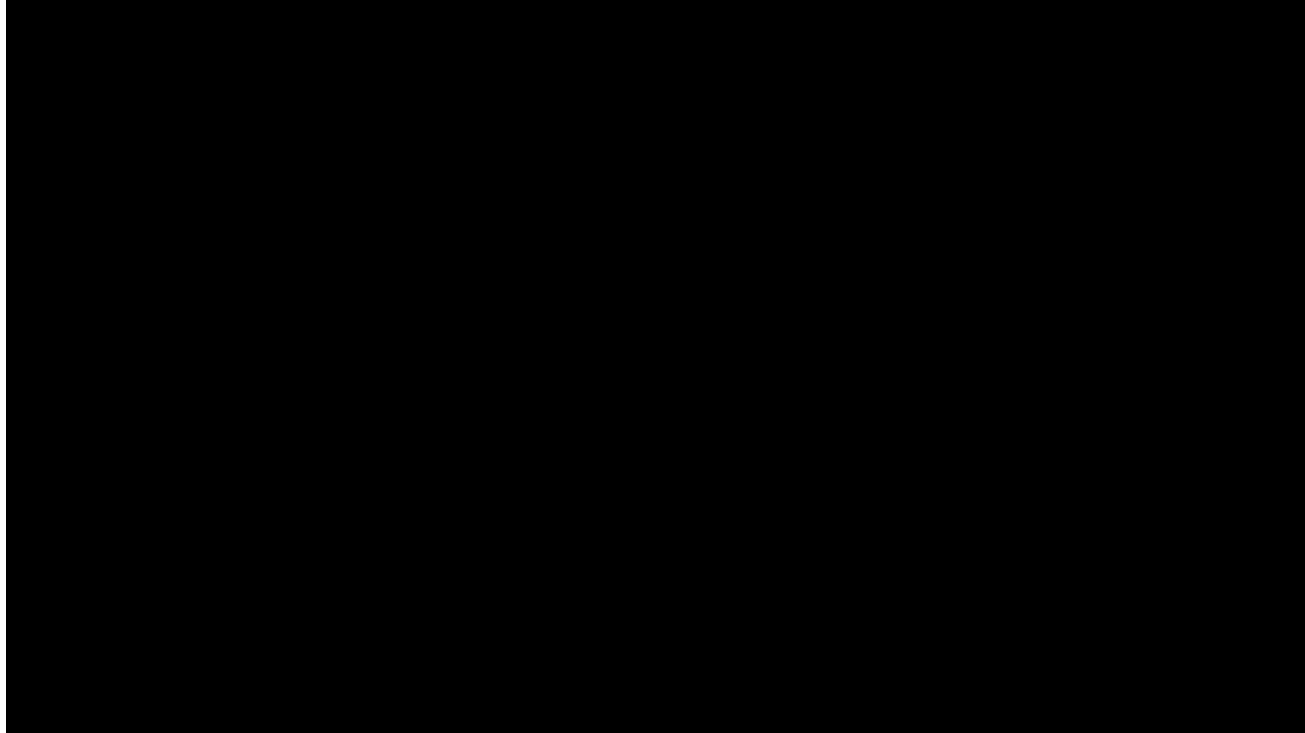


Workflow opérationnel (dans la vraie vie)

Station de caractérisation des molécules à haute résolution



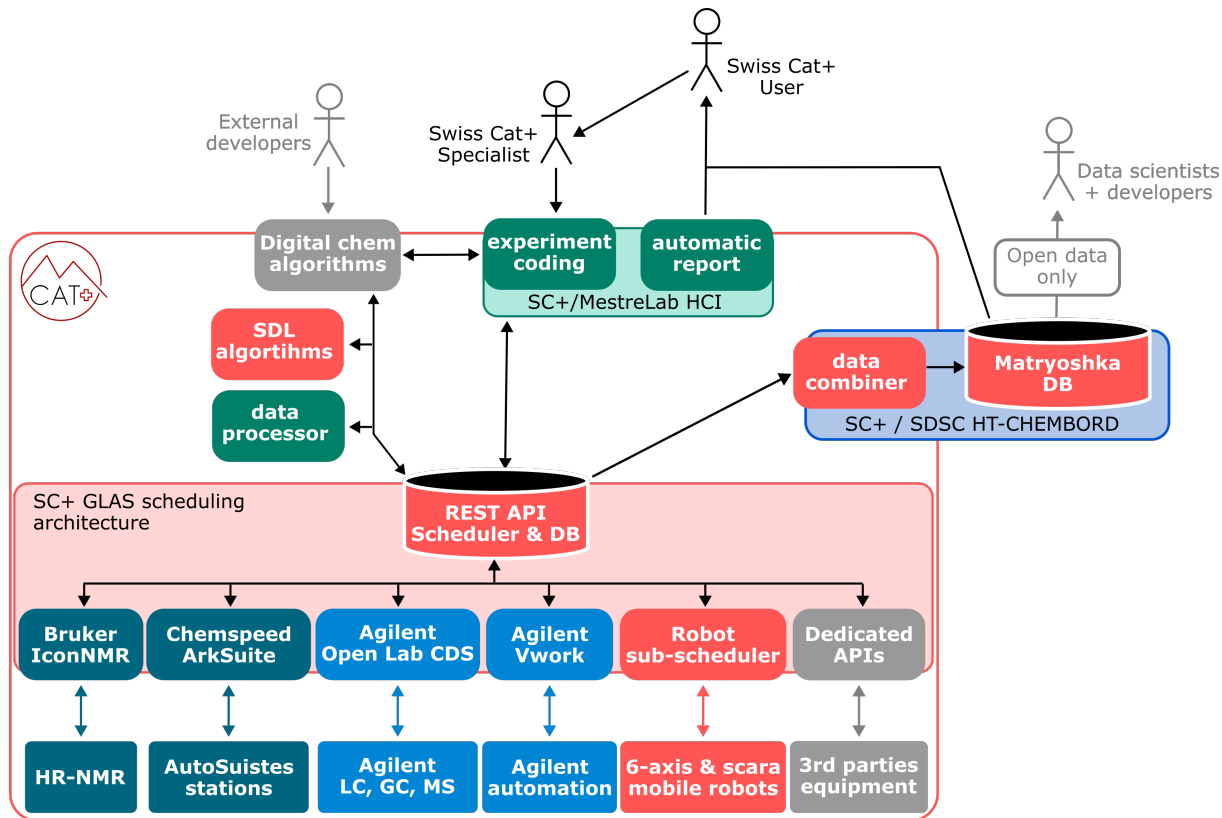
The 2D drone swarm sample transfer system



Vitesse de lecture 2x

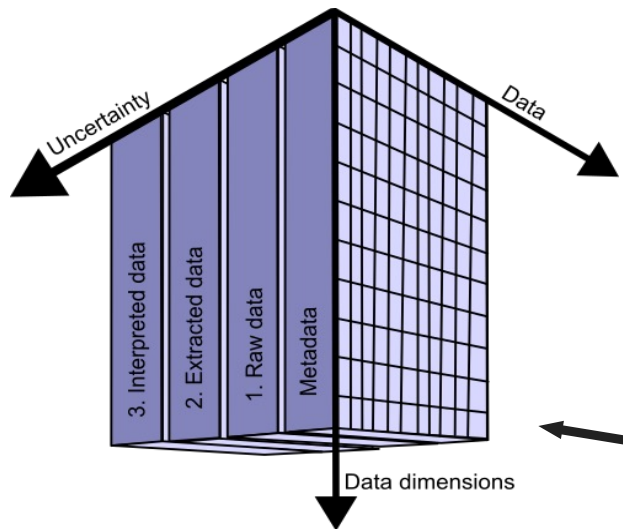


IT structure

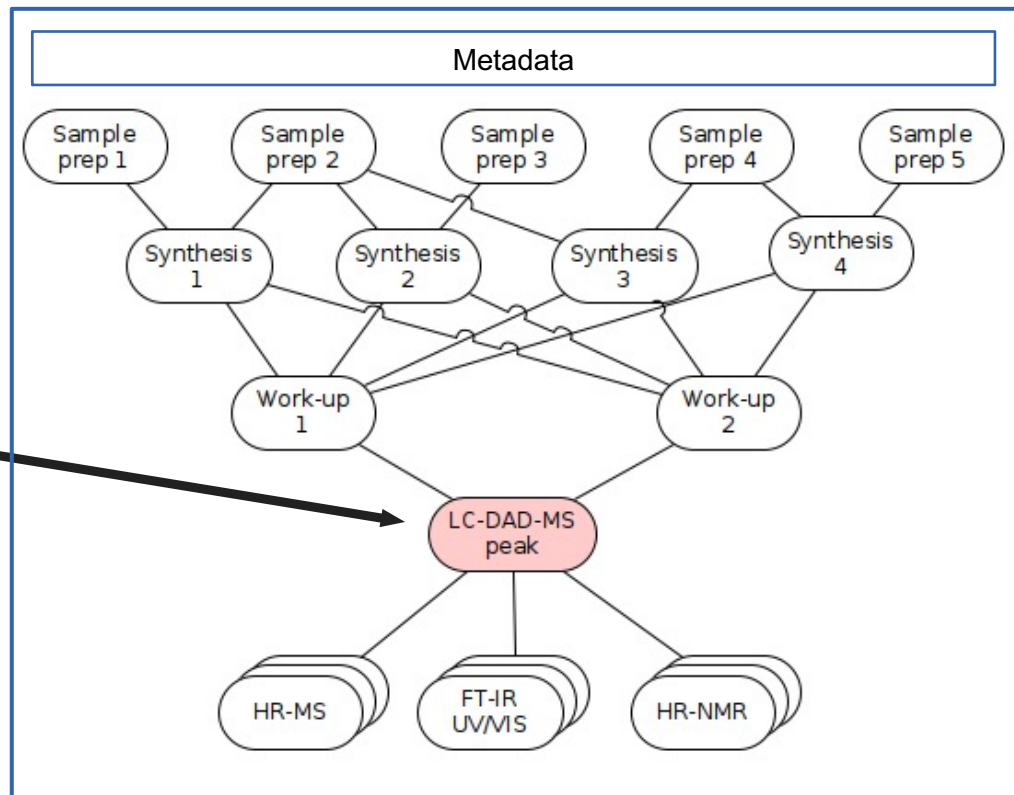


Cousty J-C et al. GLAS : An open-source easily expandable Git-based Scheduling Architecture for integral Lab Automation, *Digital Discovery*, 2024, Advance Article
doi.org/10.1039/D4DD00253A

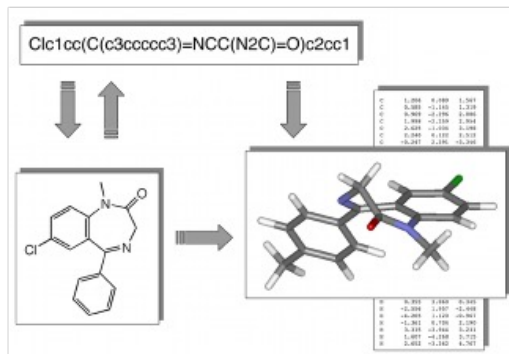
Ontologie de données, le matryoshka file (ou le fichier poupée russe)



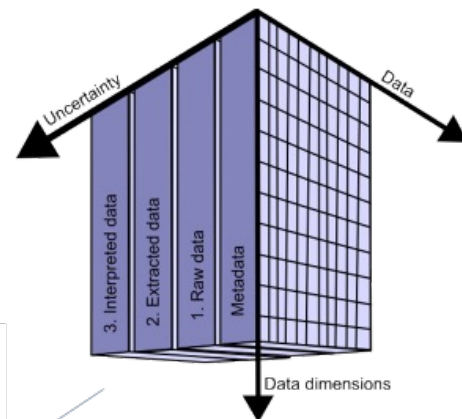
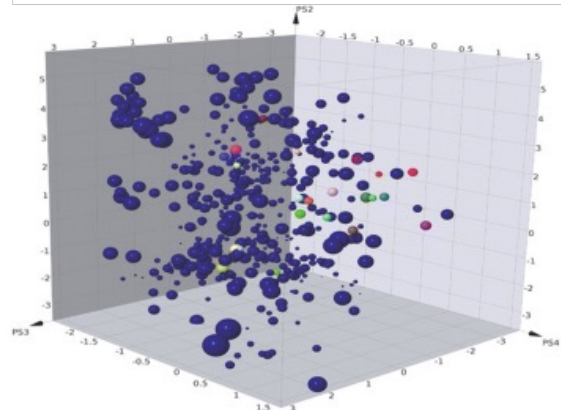
Une **représentation moléculaire** complète, adaptée au digital et contenant toutes les données préparatives et analytiques (format .zarr)



Exploration de l'espace chimique

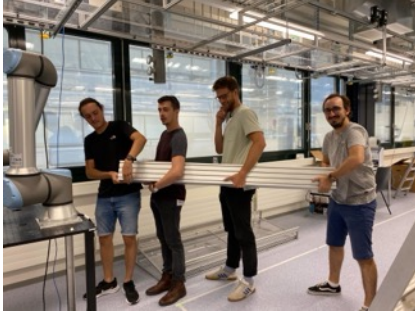


Exploration structurelle



Exploration multidimensionnelle

Acknowledgments



Active members funded by ETH-RAT

Dr. P. Miéville (executive Director chemist)
 Dr. S. di Leone (scientist chemist)
 Dr. N. V. T. Nguyen (scientist chemist)
 H. Francelet (admin, 50%)
 J.-C. Cousty (IT developer)
 E. Mariano (robotics engineer)
 E. Clerc (chem technician)
 P. Gaumann (chem technician)

Active members funded by other funds

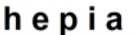
K. Villat (microtechnics engineer, 50%)
 H. Zolonowski (microtechnics engineer, 50%)
 C. Gachet-Aquillion (chem technician, 30%)
 M. K. Villat (microtechnics engineer, 50%)
 C. Cheyrouse (apprentice lab technician 70%)
 C. Monheo dos Anjos (apprentice lab technician 70%)
 M. Lowenberg (apprentice automation technician 70%)

Students

Y. Coderey (robotics master student)
 L. Choudhury (chem master student)
 H. Greulich (chem master student)
 E. Sölvi Oskarson (chem master student)
 M. Huewei Liu (robotics bachelor student)
 M. Tanguy Cavagna (computer sciences bachelor student)
 M. Alec Schmidt (computer sciences bachelor student)

Special collaborations

Prof. M. Kunze - automation - HEIG-VD
 Prof. J. Hugues - robotics – EPFL
 Prof. P. Schwaller – digital chem - EPFL
 Dr. R. Williams - Soft Director – Agilent
 Dr. Santi Domingez – CEO – MestreLab
 Dr. Till Khun – VP – Bruker Switzerland
 Dr. A. Habou-Amdan - VP - Chemspeed



Haute école du paysage, d'ingénierie
 et d'architecture de Genève

