

Laboratoire SIMBA

1 - Informations générales :

IDENTIFICATION	
Nom du Laboratoire	SIMBA : Synthèse et Isolement de Molécules BioActives
Type d'unité, n° ...	SIMBA EA-7502
Directeur	Alain Gueiffier 02 47 36 70 15 alain.gueiffier@univ-tours.fr
Adresse	31 Avenue Monge, 37200 Tours
Thèmes de recherche	Mise au point de nouveaux outils méthodologiques pour la synthèse et la fonctionnalisation d'entités hétérocycliques Synthèse et isolement de molécules à visée anti-infectieuse et anti-cancéreuse Innovation en chimie extractive : Chromatographie de Partage Centrifuge, Solvants Eutectiques Profonds
Research topics	Development of new methodological tools for the synthesis and functionalization of heterocycle scaffolds Synthesis and isolation of anti-infectious and anti-cancer molecules Innovation in Extractive Chemistry: Centrifugal Partition Chromatography, Deep Eutectic Solvents
Mots-clés	Chimie hétérocyclique, molécules fluorées, synthèse organométallique, cristallographie, chimie médicinale, phytochimie, solvants eutectiques, anti-cancéreux et anti-infectieux, Chromatographie de Partage Centrifuge
Keywords	Heterocyclic chemistry, fluorinated compounds, organometallic synthesis, crystallography, medicinal chemistry, phytochemistry, Deep eutectic solvents, Centrifugal Partition Chromatography

2 - Le laboratoire en résumé :

Résumé

Les thématiques de recherche développées au sein de notre équipe sont centrées sur le développement de molécules bioactives pour la cancérologie et l'infectiologie.

Un premier axe fondamental s'intéresse au développement de nouvelles voies d'accès à ces molécules par synthèse ou isolement à partir de ressources naturelles. Le volet synthèse organique s'oriente vers la recherche de nouvelles méthodes d'hétérocyclisation permettant d'obtenir ou d'améliorer la synthèse d'hétérocycles originaux ou d'obtention difficile. Nous développons également des méthodes de fonctionnalisation originales par voie organométallique. Le volet isolement s'intéresse au développement de méthodes innovantes d'extraction, de purification ou d'analyse de matrices complexes. Deux techniques chromatographiques sont particulièrement étudiées : la chromatographie de partage centrifuge et l'HPTLC. Une thématique commune aux deux volets s'intéresse à la valorisation de nouveaux solvants verts, les Solvants Eutectiques Profonds, à la fois pour la synthèse ou l'extraction.

Le second axe appliqué s'attache à l'évaluation biologique de molécules synthétisées ou isolées au laboratoire. Un premier volet s'intéresse au design de molécules à visée anticancéreuse inspirées de molécules naturelles telles que les lamellarines ou l'harmine. De nouveaux analogues trifluorométhoxylés du tamoxifène sont également développés. Le second volet est centré autour de la recherche de nouvelles thérapies anti-infectieuses. L'étude de molécules à visée anthelminthique pour la santé animale est abordée au travers du design de nouveaux composés ou par la valorisation de plantes issues de la médecine traditionnelle. Egalement, la mise au point de nouvelles approches pour la lutte contre des pathologies fongiques réfractaires (mycétome, biofilm) est abordée. Enfin, de nouveaux composés sont développés pour la lutte contre des bactéries résistantes aux antibiotiques telles que *Pseudomonas aeruginosa* ou *Mycobacterium tuberculosis*.

Abstract

The research themes developed within our team focus on the development of bioactive molecules for oncology and infectiology.

A first fundamental axis focuses on the development of new access routes to these molecules by synthesis or isolation from natural resources. The organic synthesis component focuses on the search for new heterocyclization methods to obtain or improve the synthesis of original or difficult-to-prepare heterocycles. We are also developing novel functionalization methods using organometallic pathways. The natural products field focuses on the development of innovative methods for extraction, purification or analysis of plant complex matrices. Two chromatographic techniques are particularly studied: centrifugal partition chromatography and HPTLC. A common theme in both areas focuses on the valorisation of new green solvents, Deep Eutectic Solvents, for both synthesis and extraction.

The second applied axis focuses on the biological evaluation of molecules synthesized or isolated in the laboratory. The first part focuses on the design of anticancer molecules inspired by natural molecules such as lamellarins or harmine. Novel trifluoromethoxylated analogs of tamoxifen are also being developed. The second part focuses on the search for new anti-infectious therapies. The study of anthelmintic molecules for animal health is approached through the design of new compounds or the valorization of plants from traditional medicine. Also, the development of new approaches for the fight against refractory fungal pathologies (mycetoma, biofilm) is studied. Finally, new compounds are developed for the fight against antibiotic-resistant bacteria such as *Pseudomonas aeruginosa* or *Mycobacterium tuberculosis*.

3 – Informations détaillées :

Compétences et savoir-faire
<ul style="list-style-type: none"> - Chimie organique, hétérocyclique et organométallique - Extraction et purification : Chromatographie de Partage Centrifuge, polyphénols, lipides - Chimie verte : solvants eutectiques profonds - Chimie médicinale
Skills and know-how
<ul style="list-style-type: none"> - Organic, organometallic and heterocyclic chemistry - Extraction and purification : Centrifugal partition chromatography, polyphenols, lipids - Green chemistry : deep eutectics solvents - Medicinal chemistry

Domaines d'application
<ul style="list-style-type: none"> - Industrie pharmaceutique et biomédicale - Agroalimentaire - Industrie cosmétique
Application areas
<ul style="list-style-type: none"> – Pharmaceutical and biomedical industry – Agroalimentary – Cosmetics

Prestations
Expertise phytochimique (screening phytochimique, fractionnement, dosages de métabolites)
Services
HPLC, Analyses spectroscopiques, Structure 3D, Analyses par diffraction X

Equipements et technologies
<ul style="list-style-type: none"> - Diffractomètres rayons X - Chaînes HPLC DAD, HPTLC-densitométrie, GC-FID - Chaîne UPLC-MS - Fluorescence RX - Chromatographie de Partage Centrifuge (CPC) - Microonde de synthèse - Lecteur de microplaques - Système de purification combi-flash - Spectromètre IR-ART

4 – Principaux partenariats :

Principaux partenariats	
Universitaires et publics	UMR INRA 1282 (ISP), Tours INSERM U 1069 (N2C), Tours INSERM CEPR, Tours Université : Poitiers (UMR CNRS 7267 EBI, EA LITEC), Marseille (ISM2), Montpellier (IRIm) CEA le Ripault de Monts
Internationaux	Belgique : Université de Leuven (UCL), Université de Namur (CBO) Universités : Tunis El-Manar (Tunisie), Laval (Québec), Lomé (Togo), (Gezira et Khartoum) Soudan
Privés	Orgapharm (Pithiviers) Indena (Tours) Dénitral-COOPERL (Lamballe)