

**Atelier PARIS  
"Bases de données"  
7-8 avril 2004**

**Fiche de participation**  
**À envoyer impérativement avant le 28 mars 2004**

à Mme Annie TALBOT  
Institut de Physique Nucléaire  
Tél. : 01.69.15.51.00; Fax : 01.69.15.30.93. E-mail : talbot@ipno.in2p3.fr

**Nom :**

**Prénom :**

**Laboratoire (nom et adresse complète) :**

**Tél. :**

**Fax :**

**E-mail :**

**SÉMINAIRE**

**Je souhaite présenter une Affiche : OUI**   
**NON**

**Si oui, titre de la communication :**

**Auteurs de la communication :**

\_\_\_\_\_   
Dimensions maximales des affiches : horizontal 80 cm, vertical : 120 cm

**Travaux Pratiques**

**Je souhaite participer aux Travaux Pratiques sur l'utilisation d'ISISBase,  
ChemOffice et SXD-INTERNET:**

**OUI**   
**NON**

## Déjeuners

**Je souhaite participer au déjeuner du 7 avril :** OUI  NON   
**au déjeuner du 8 avril :** OUI  NON

Chaque participant s'occupe lui-même de la réservation de sa chambre en prenant contact avec l'hôtel.

**Voir liste jointe ci-dessous.**

Nous vous conseillons de prendre contact avec les hôtels le plus rapidement possible.

Participera au deجو

Chère Collègue,  
Cher Collègue,

L'Atelier « BASES DE DONNEES » du GdR PARIS aura lieu les 7-8 avril à la Faculté de Chimie de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg et se déroulera selon le programme joint.

Si vous désirez participer à cet Atelier ayez l'amabilité de bien vouloir transmettre votre feuille d'inscription **avant le 28 mars 2004, dernier délai**, à Mme A. TALBOT (IPN-Orsay, Tel. : 01. 69. 15. 51. 00). La clôture du dossier des demandes de mission est le 1<sup>er</sup> avril 2004.

Les orateurs et ceux qui présentent une ou des affiches sont priés de bien vouloir apporter avec eux la copie (papier ou disquette) de l'affiche et/ou des transparents présentés et un court texte de synthèse que nous réunirons dans les « Actes de l'Atelier « BASES DE DONNEES ». S'il vous plaît, notez que les logiciels à utiliser sont exclusivement : WORD et POWER POINT ou PDF pour PC ; ceci permettra une édition plus facile des *Minutes de l'Atelier* sous forme de CD-ROM.

Ci-dessous vous trouverez quelques informations pratiques. Pour toutes informations complémentaires veuillez consulter le site WEB de l'atelier :

<http://infochim.u-strasbg.fr/recherche/conferences>

A la réception de votre fiche d'inscription A. TALBOT vous adressera un dossier de demande de mission qui s'accompagnera d'une lettre explicative ; il est important de suivre les instructions portées sur ce courrier et de joindre les pièces demandées. L'adresse de votre laboratoire sur la fiche d'inscription (et sur la feuille de mission) doit être complète.

Dans le cadre du GdR PARIS, vous devrez faire l'avance de vos frais de voyage (train ou avion), de l'hôtel et des repas des 7 et 8 avril. Ces frais vous seront remboursés par le CNRS sur justificatif ; pour cela demander une facture pour les titres de transport, et les notes de frais pour la restauration et l'hôtel. ATTENTION et cela UNIQUEMENT pour les agents NON CNRS, joindre UN ORDRE DE MISSION SANS FRAIS de votre laboratoire d'origine.

**Rappel : Merci d'envoyer votre dossier complet avant la date limite du 28 mars 2004 à A. TALBOT**

Nous vous remercions par avance de votre participation à l'Atelier « BASES DE DONNEES » et nous espérons que les discussions y seront fructueuses.

P. TURQ et M. LECOMTE  
assistés d'E. SIMONI et  
C. MADIC

**BASES DE DONNEES**

La complexification et la diversification des tâches de recherche se traduit par une multiplication des résultats et ce foisonnement n'est plus gérable à l'échelle humaine, hors d'un domaine étroit. La solution proposée depuis longtemps pour tenter de résoudre cette difficulté est d'avoir recours à des systèmes de documentation automatique, si possible avec un pré-traitement et une analyse de l'information, amenant la constitution de bases de données. Dans le domaine du nucléaire, plusieurs difficultés supplémentaires se produisent du fait de l'abondance de la proportion de la littérature "grise", c'est à dire ne se trouvant pas dans des revues ou des ouvrages accessibles. La difficulté des expérimentations impose que la modélisation soit associée étroitement au processus d'acquisition et de traitement de l'information scientifique, ceci aussi bien pour la littérature existante que pour les études en développement.

L'atelier « Bases de données » se déroulera autour de 3 thèmes principaux :

- Acquisition et validation de données expérimentales ;
- Bases de données (largement utilisées dans le domaine et/ou développées par des participants de PARIS) ;
- Acquisition de connaissances à partir de l'expérience et leurs utilisations dans le développement de nouveaux systèmes.

Une séance de démonstration de bases de données développées par les **PARISIENS** ainsi que des outils commerciaux est prévue.

Pour ceux qui souhaitent développer leurs propres bases en utilisant les logiciels *ISISBase*, *ChemOffice* et *SXD-INTERNET*, une séance de « travaux pratiques » pourrait également être organisée.

## En hôtel, quelques suggestions

---

**Attention** : veuillez à réserver rapidement votre chambre, Strasbourg accueillant beaucoup de touristes et de congressistes

**HOTEL DE L'ESPLANADE\*\***

1, boulevard Leblois  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.61.38.95  
e-mail : [hotel.esplanade@wanadoo.fr](mailto:hotel.esplanade@wanadoo.fr)

**HOTEL COUVENT DES FRANCISCAINS\*\***

18, rue du Faubourg de Pierre  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.32.93.93

**HOTEL SUISSE\*\***

2-4, rue de la Rape  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.35.22.11

**HOTEL AUX TROIS ROSES\*\***

7, rue de Zurich  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.36.56.95

**HOTEL IBIS PETITE-FRANCE\*\***

18, rue du Faubourg National  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.75.10.10

**ETAP HOTEL CENTRE GARE**

13, Place De La Gare,  
67000 STRASBOURG  
**à partir de 39 EURO**

**HOTEL KLEBER\*\***

29, place Kléber  
67000 STRASBOURG  
Internet : [hotel-kleber.com](http://hotel-kleber.com)  
**de 40 à 49 EURO**

**HOTEL LE PETIT TRIANON\*\***

8, petite rue de la course  
67000 STRASBOURG  
Internet : [strasbourg.com/petit-trianon/index.html](http://strasbourg.com/petit-trianon/index.html)  
**de 36 à 43 EURO**

**HOTEL de l'ILL**

8, rue des Bateliers  
67000 STRASBOURG  
Tél. : 03.88.36.20.01  
Fax : 03.88.35.30.03

---

# Atelier PARIS

## "Bases de données"

Strasbourg, les 7 et 8 avril 2004

### PROGRAMME

#### *Mercredi 7 avril*

**8 h 30**      *Accueil*

9 h 00      Le mot de bienvenue de PARIS

9 h 20      C. Laurenço (Ecole de Chimie, Montpellier)  
Les bases de données chimiques en France

10 h 00      L. Petitt (Academic Software, Otley, UK)  
IUPAC Stability Constants Database

10 h 40                      *Pause-Café*

11 h 00      G. Cote (ENSCP, Paris)  
Diversité des données à acquérir pour modéliser les systèmes complexes: cas du système eau / acide nitrique / TBP / nitrate d'uranyle

11 h 30      V. Solov'ev (Ac. Sci. Russ) et A. Varnek (ULP, Strasbourg)  
Une base de données pour l'extraction liquide-liquide

**12 h 00**                      *Déjeuner*

14 h 00      T. Hanser (IXELIS, Strasbourg)  
Nouveaux outils de saisie et de présentation de données chimiques

14 h 30      Ph. Moisy (VALRHO/CEA Marcoule)  
Acquisition de données thermodynamiques (coefficient osmotique) pour les sels de nitrate d'actinide (IV et V) et de l'acide pertechnétique

15 h 00      P. Vitorge (CEA Saclay)  
Sélection critique de données suivant la méthodologie de la banque de donnée TDB de l'AEN-OCDE

15 h 30      J. van der Lee (École des Mines de Paris)  
Le projet CTDP : une base XML de données thermodynamiques

16 h 00 L. Bion (CEA Saclay)  
Base de données "BASSIST" : l'impact du choix de données thermodynamiques sur les calculs de spéciation

16 h 30 *Positionnement des Affiches et Pause-Café*

16 h 50 **SEANCE AFFICHES**

17 h 50 *Fin de la première journée*

### ***Jedi 8 avril***

8 h 30 *Accueil*

9 h 00 F. Arnaud-Neu (ECPM, Strasbourg)  
Evaluation critique de constantes de stabilité de complexes de métaux avec des éthers-couronnes

9 h 30 M. Gaune-Escard (Ecole Polytechnique, Marcelle)  
Bases de données et système d'information interactif pour les sels fondus.

10 h 00 E. Ansoborlo (VALRHO/CEA Marcoule)  
L'intérêt des bases de données pour la spéciation des actinides en milieu bio : application à la toxicologie nucléaire.

10 h 30 *Pause-Café*

11 h 00 P. Baron (VALRHO/CEA Marcoule)  
Besoins pour la modélisation des opérations d'extraction liquide-liquide

11 h 30 A. Varnek (ULP, Strasbourg)  
Développement *in silico* de nouveaux extractants et complexants

12 h 00 *Déjeuner*

### **IV. Démonstration de logiciels et travaux pratiques (14 h 00 – 16 h 40).**

1. Démonstration des logiciels présentés par des conférenciers (salles d'informatique 1 et 3).
2. Travaux pratiques consacrée à la création d'une base de données en utilisant les logiciels IsisBase, ChemOffice et SXD-INTERNET (salle d'informatique 2).  
*A. Varnek, V. Solov'ev, D. Fourches, N. Sieffert (ULP, Strasbourg)*

16 h 40 Discussion

17 h 00 *Fin de l'atelier*

Les conférences auront lieu dans le Grand Amphi de Chimie (Faculté de Chimie, ULP).  
La démonstration de logiciels et les travaux pratiques seront organisés dans les salles d'informatique 1 – 3 à la Faculté de Chimie.