

## Atelier « Descripteurs » de la Chimiothèque Nationale Le 22 mars, 14h – 18h

14h00 - 14h15 **Dragos Horvath (Univ Lille)**  
Bilan d'activité de l'atelier « Descripteurs »

14h15 - 14h45 **Kiet Tran (Univ Montpellier)**  
Evolution du site INTERNET de la Chimiothèque Nationale

14h45 - 15h15 **Luc Morin-Allory (Univ Orléans)**  
« ScreeningAssistant » – un logiciel de gestion de chimiothèques pour le criblage

15h15 - 15h45 **Denis Fourches (Institut de Chimie, ULP, Strasbourg)**  
Utilisation de modèles multiples : les approches Combi-QSAR et DC-QSAR.

**15h45 - 16h00** pause (15 mn)

16h00 - 16h30 **Gilles Marcou (Institut de Chimie, ULP, Strasbourg)**  
Classification d'activité antibiotique des composés de la Chimiothèque Nationale

16h30 – 16h55 **Didier Rognan (Faculté de Pharmacie, ULP, Strasbourg)**  
Nouveaux outils pour la bio et la chimio-informatique

17h00 – 17h45 Table ronde (animation: **Luc Morin Allory**)  
Diversité moléculaire - étude préalable à la constitution de la chimiothèque essentielle.

17h45 – 18h00 clôture **Dragos Horvath et Philippe Jauffret**  
Perspectives de l'atelier