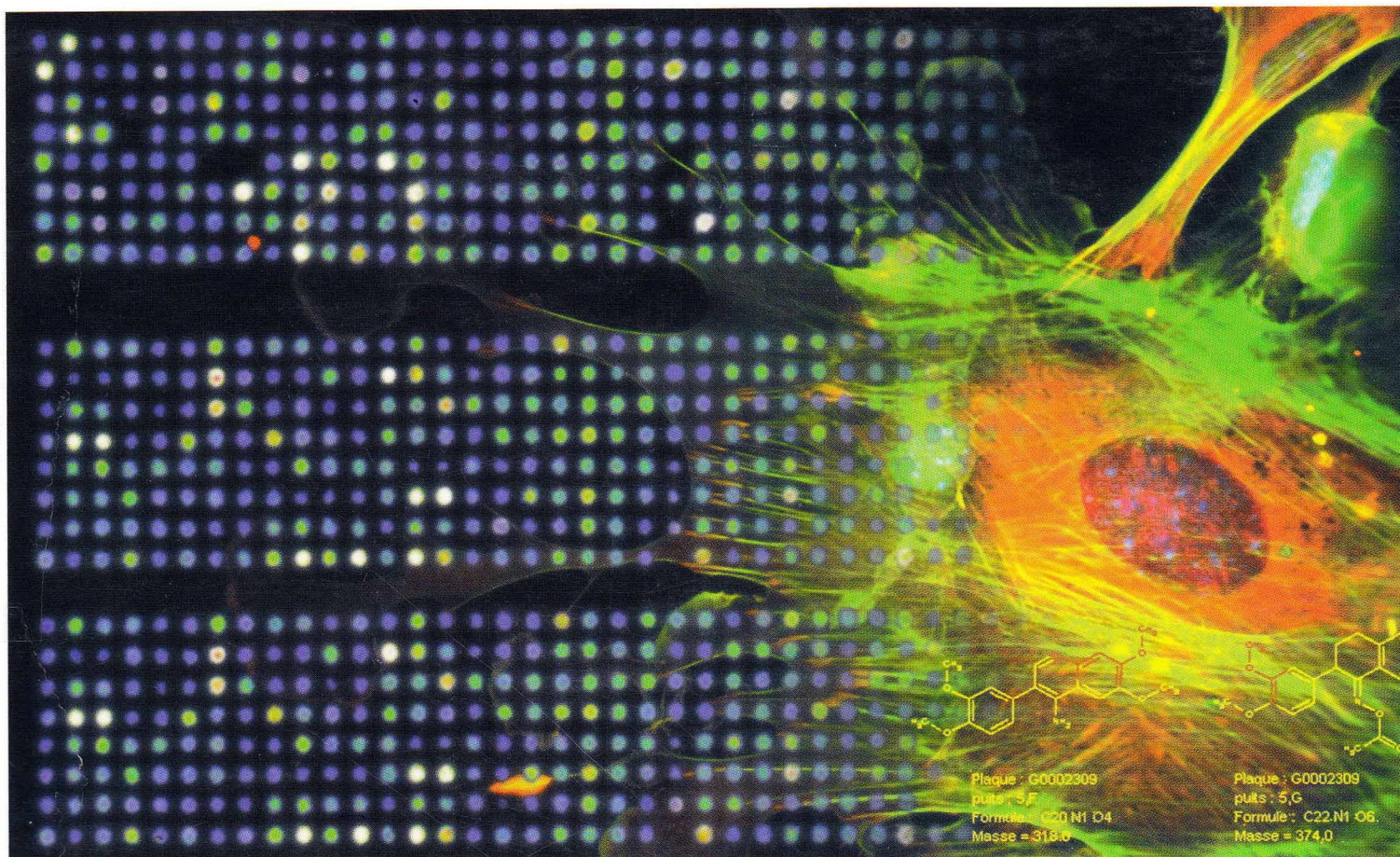




# CHEMOGÉNOMIQUE

## DES PETITES MOLÉCULES POUR EXPLORER LE VIVANT

■ sous la direction de  
**Eric MARÉCHAL**  
**Sylvaine ROY**  
**Laurence LAFANECHÈRE**



# SOMMAIRE

---

**Préface** 1

**Introduction** 3

## PREMIÈRE PARTIE

### LE CRIBLAGE PHARMACOLOGIQUE AUTOMATISÉ

**Chapitre 1 - Le processus de criblage pharmacologique :  
la petite molécule, la cible biologique, l'automate, le signal et l'information** 7  
*Eric MARÉCHAL - Sylvaine ROY - Laurence LAFANECHÈRE*

**Chapitre 2 - Les collections de molécules pour le criblage :  
exemple de la Chimiothèque Nationale** 23  
*Marcel HIBERT*

**Chapitre 3 - L'essai biologique miniaturisé : contraintes et limites** 29  
*Martine KNIBIEHLER*

**Chapitre 4 - Le signal : aspects statistiques, normalisation, analyse élémentaire** 45  
*Samuel WIECZOREK*

**Chapitre 5 - La mesure de la bio-activité :  $K_i$ ,  $IC_{50}$  et  $EC_{50}$**  57  
*Eric MARÉCHAL*

**Chapitre 6 - La modélisation du criblage pharmacologique :  
maîtrise des processus et des informations chimiques, biologiques et expérimentales** 69  
*Sylvaine ROY*

**Chapitre 7 - La démarche qualité pour le criblage automatisé** 81  
*Caroline BARETTE*

**DEUXIÈME PARTIE**  
**LE CRIBLAGE À HAUT CONTENU D'INFORMATION**  
**ET LES STRATÉGIES POUR LA GÉNÉTIQUE CHIMIQUE**

<b>Chapitre 8 - Le criblage phénotypique sur cellules et les stratégies de génétique chimique directe</b> <i>Laurence LAFANECHÈRE</i>	<b>91</b>
<b>Chapitre 9 - Le criblage à haut contenu d'information pour la génétique chimique directe (criblage phénotypique sur organismes) et inverse (criblage structural par RMN)</b> <i>Benoît DÉPREZ</i>	<b>109</b>
<b>Chapitre 10 - Quelques principes sur la Synthèse Orientée vers la Diversité</b> <i>Yung-Sing WONG</i>	<b>121</b>

**TROISIÈME PARTIE**  
**VERS UNE EXPLORATION *IN SILICO* DES ESPACES CHIMIQUE ET BIOLOGIQUE**

<b>Chapitre 11 - Descripteurs moléculaires et indices de similarité</b> <i>Samia ACI</i>	<b>143</b>
<b>Chapitre 12 - La lipophilie des molécules : un descripteur prépondérant pour la QSAR</b> <i>Gérard GRASSY - Alain CHAVANIEU</i>	<b>161</b>
<b>Chapitre 13 - L'annotation et la classification de l'espace chimique pour la chemogénomique</b> <i>Dragos HORVATH</i>	<b>181</b>
<b>Chapitre 14 - L'annotation et la classification de l'espace biologique pour la chemogénomique</b> <i>Jordi MESTRES</i>	<b>195</b>
<b>Chapitre 15 - Apprentissage artificiel et données de criblage</b> <i>Gilles BISSON</i>	<b>207</b>
<b>Chapitre 16 - Criblage virtuel par docking moléculaire</b> <i>Didier ROGNAN</i>	<b>225</b>
<b>Glossaire</b>	<b>237</b>
<b>Table des matières</b>	<b>251</b>