

Nom de l'UE : Chemoinformatique et Drug Design (HAC920C9)

Description :

Les thématiques de l'UE sont les suivantes :

Une partie théorique dédiée à la chemoinformatique

Une partie théorique dédiée plus spécifiquement aux outils de modélisation pour le drug-design

Une partie dédiée à l'aspect pratique avec un travail sur ordinateurs

Mots-clés :

Chemoinformatic & Molecular modelling.

Drug-design. Ligand et Structure-based drug design.

Objectifs :

A partir de connaissances sur les interactions moléculaires, d'éléments de biochimie et biologie structurale, l'objectif est de donner aux étudiants une expérience pratique sur postes de travail en Chemoinformatique et en modélisation moléculaire. Les limitations et les possibilités de plusieurs logiciels seront ainsi appréhendées.

Volumes horaires :

CM : 15 H

TD : 5 H

TP :

Terrain :

Pré-requis nécessaires :

Une licence en chimie ou biologie

Pré-requis recommandés :

Contrôle des connaissances :

Contrôle écrit terminal de 2H.

Syllabus :

Cours : 15H

1. CHEMICAL MOLECULE

Representation and research of structures and substructures.

Similarity search (2D / 3D), clustering and diversity analysis.

Search of chemical molecules in patent databases or chemical reactions.

2. ENERGY INTERACTIONS

Molecular interactions, docking, molecular mechanics, molecular dynamics. Qasr 3D, ADMET.

Notions of structural biology of macromolecules.

3. Structure and Ligand based drug design.

Introduction to Fragment based drug-design.

TD : 5H

Several case studies will be possible :

Design of a virtual library to inhibit protein-protein interactions.

Kinase inhibitors, design and medicinal chemistry

Responsables :

Christine Enjalbal et Alain Chavanieu

Equipe pédagogique :

Christine Enjalbal et Alain Chavanieu