

## Faculté de médecine



## FARM1359 Drug design en chimie pharmaceutique

[15h] 2 crédits

**Enseignant(s):** Didier Lambert (coord.), Jacques Poupaert  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** Premier cycle

**Objectifs (en termes de compétences)**

Le cours vise à initier l'étudiant à la conception rationnelle de médicaments (" drug design ") au moyen d'exemples choisis tant dans les modulations pharmaco-chimiques classiques que dans l'approche rationnelle basée sur la structure tridimensionnelle de la cible. Il propose en outre une introduction à la modélisation moléculaire (mécanique moléculaire, dynamique moléculaire, et méthodes semi-quantiques) et aux méthodes de drug discovery moderne utilisant le recours à des banques de produits (chimie combinatoire, high trough-put screening, ...).

**Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)**

Ce cours à options se propose d'approfondir les notions présentées au cours de chimie pharmaceutique.

Les notions de drug design sont abordés au travers d'exemples choisis. Elles comprendront:

- les concepts de pharmacomodulations (ligands des récepteurs opioïdes, GABA, glutamate, mélatonine, dopamine et sérotonine)
  - Approche rationnelle basée sur la structure (de la cible biologique): inhibition enzymatique
- Connaissance de la structure tridimensionnelle (rayons X, RMN, modélisation moléculaire, approche par pharmacophore) en intégrant les notions vues au cours de biophysique, interactions principe actif-cible (" docking ", mutagenèse dirigée, chimères, co-cristallisation#)