



Master : Sciences du Médicament

Parcours : Biologie Structurale et Conception Rationnelle de Molécules Bioactives

UE – Drug Design											
Positionnement	Master 2 - Semestre 1										
Crédits	2 ECTS										
Responsable	Pr Vincent Lisowski vincent.lisowski@univ-montp1.fr										
Intervenants	Enseignants-Chercheurs : L. Maillard, C. Masquefa, P.A. Bonnet, V. Lisowski										
Objectifs	Cette unité d'enseignement permettra d'acquérir de solides bases en chimie médicinale nécessaires à la compréhension du processus de conception, d'optimisation et de développement du principe actif médicament.										
Description (20h CM)	<p>L'enseignement comprend 20 h de cours sous forme de cours magistraux abordant les thèmes suivants :</p> <p>I. Relations entre la structure chimique, l'affinité in-vitro et l'activité pharmacologique</p> <p><i>I.1 Paramètres physicochimiques gouvernant l'affinité</i></p> <p><i>I.1.1 Critères enthalpiques</i></p> <p><i>I.1.2 Critères entropiques</i></p> <p><i>I.2 Paramètres physicochimiques gouvernant le devenir dans l'organisme</i></p> <p><i>I.3 Justification des paramètres pris en compte par Lipinski et Veber</i></p> <p>II. Structure-based drug design : application aux inhibiteurs de protéases</p> <p><i>II.1 Familles de protéases et leurs mécanismes enzymatiques</i></p> <p><i>II.2 Evaluation de l'activité antiprotéase</i></p> <p><i>II.3 Découverte des inhibiteurs de protéases du HIV</i></p> <p><i>II.4 Découverte des inhibiteurs de l'enzyme de conversion</i></p> <p>III. Conception d'un médicament par analogie structurale: Analog Design</p> <p><i>III.1 Concepts de bioisostérie</i></p> <p><i>III.2 Importance de la chiralité</i></p> <p><i>III.3 Etudes de cas : exemple immunomodulateurs</i></p> <p>IV. Approches Combinatoires et Approches par Fragments</p> <p><i>IV.1 Principes et limites des stratégies HTS</i></p> <p><i>IV.2 Principes théoriques des approches par fragments</i></p> <p>V. Stratégies pour la conception de prodrogues</p>										
Mots clés	Drug design – Interactions drug/cible – Interactions drug/milieu in vivo – Structure-, analog- et combinatorial based drug design – prodrogues.										
Modalités de contrôle des connaissances	<table border="1"><tbody><tr><td><i>1^{ère} session</i></td><td><i>Ecrit</i></td><td><i>Oral</i></td><td><i>Rapport</i></td><td><i>CC</i></td></tr><tr><td><i>Note/40</i></td><td><i>1h30</i></td><td><i>Non</i></td><td><i>Non</i></td><td><i>Non</i></td></tr></tbody></table> <p><i>2^{ème} session : mêmes modalités</i></p>	<i>1^{ère} session</i>	<i>Ecrit</i>	<i>Oral</i>	<i>Rapport</i>	<i>CC</i>	<i>Note/40</i>	<i>1h30</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>
<i>1^{ère} session</i>	<i>Ecrit</i>	<i>Oral</i>	<i>Rapport</i>	<i>CC</i>							
<i>Note/40</i>	<i>1h30</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>							