

## UE-8 Notion de Drug Design and Drug Discovery

Niveau d'étude  
**Bac +5**

ECTS  
**3 crédits**

Composante  
**Santé**

Période de l'année  
**Semestre 3**

### En bref

- # **Langue(s) d'enseignement:** Français
- # **Ouvert aux étudiants en échange:** Non
- # **Référentiel ERASMUS:** Biochimie

---

## Présentation

### Description

Cet UE se propose d'approfondir les notions présentées au cours de chimie pharmaceutique (UE6). 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.

Nous évoquons aussi les approches qui partent du principe que les propriétés recherchées sont entièrement encodées dans la structure chimique du composé d'intérêt. Le défi est alors de trouver une métrique qui permet de décoder et de quantifier la propriété recherchée. On tente donc d'établir des relations quantitative entre des structures chimique et des propriétés (ici de nature pharmacologiques). On parle d'approche QSAR, pour Quantitative Structure-Activity Relationship. Nous allons nous focaliser sur l'approche dite pharmacophore.

### Objectifs

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 through-put screening, ...).

## Heures d'enseignement

CM	CM	13h
TP	TP	11h

## Pré-requis obligatoires

M1 Chimie ou Biologie ou Pharmacie

## Programme détaillé

Introduction au Drug Design (Introduction à la chimie médicinale et à la conception de médicaments) 5h CM

Drug screening during preclinical phase 8h CM

- 1) Overview - drug development and ADME
- 2) R&D process:

a. new compound discovery (target identification, development of pharmacological test, HT screening) examples of in vitro (binding assay), ex vivo and in vitro experiments case study: the captopril drug design (rational for drug design, structure- activity relationship)

b. drug optimisation: analogs screening for target affinity, ADME and toxicity prediction (drug-like properties)

c. safety pharmacology (cardio-respiratory-CNS toxicity).

d. drug optimisation cycles from chemical libraries to drug candidate through compound screening and profiling roles of in vitro and in vivo development

TP molecular docking 4h Logiciel Biova Discovery Studio Visualizer lite - (coxibs and COX1 or 2) acquisition of crystallographic structures from online protein data bank analysis of the drug interaction pocket manipulation of drug-target complexe 3D structures comparison of the disposition of drugs in their interactive pocket and correlation with biological activity.

TP coordonnées sur le sulfométhoxazole TP CMI du sulfométhoxazole 7H.

---

## Infos pratiques

## Contacts

### Responsable pédagogique

Julien Brillault

# +33 5 49 36 63 99

# julien.brillault@univ-poitiers.fr

## Lieu(x)

# Poitiers-Campus