



UE – Conception du médicament : introduction au Drug Design	
Positionnement	Master 1
Crédits	5 ECTS
Responsable(s)	Ludovic Maillard ludovic.maillard@umontpellier.fr
Objectifs / Compétences	Cette unité d'enseignement permettra d'appréhender les premières étapes du processus de drug discovery dans l'industrie pharmaceutique. Compétences: <ol style="list-style-type: none">1- justifier le choix d'une stratégie de découverte de molécules bioactives2- identifier les verrous expérimentaux et conceptuels associés à l'optimisation des paramètres biophysiques d'une tête de série3- discuter de choix stratégique dans la sélection d'un candidat médicament
Description 38h CM 8h ED	I. Les cibles thérapeutiques et physico-chimie des interactions : <i>I.1. Nature des cibles : récepteurs, enzymes, acides nucléiques, canaux ioniques...</i> <i>I.2. Principes de physico-chimie et de thermodynamique des interactions protéine-ligand.</i> <i>I.3. Notions de descripteurs moléculaires et prédiction des propriétés ADME.</i> II. Stratégies en drug discovery: <i>II.1. Espace chimique/Diversité structurale: pharmacophores et structures privilégiées dans les principales aires thérapeutiques (cardio-vasculaire, SNC, infectiologie)</i> <i>II.2. Conception rationnelle de médicament: approche historique/Relations structure activité, Structure-based drug design, Analogues de l'état de transition.</i> <i>II.3. Approches combinatoires HTS</i> <i>II.4. Approches par Fragments</i>
Mots clés	Conception de principe actif - Cibles thérapeutiques – Physico-chimie des interactions ligand/cible – Espace chimique – Pharmacophores – Relations Structure/Activité.
Formation(s) concernée(s)	Master Sciences du Médicament et Produits de Santé: parcours « Biologie structurale et drug design » et « Qualimétrie et méthodes d'analyse »