

Cours optionnel

PROJET DU MEDICAMENT

3^{ème} année, 1^{er} semestre

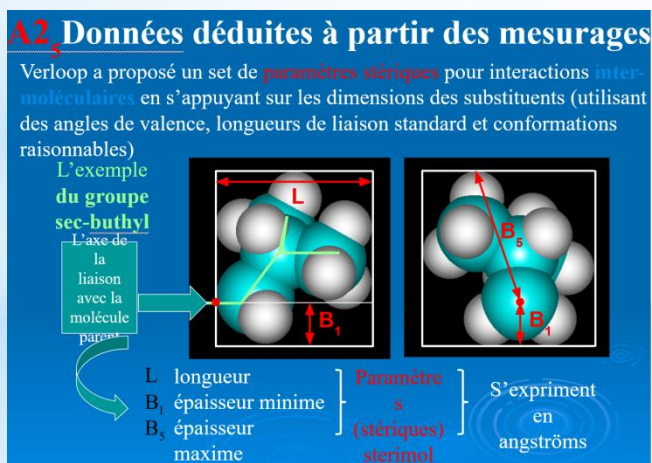
L'équipe de la discipline de Chimie physique
-prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeti
-asist.univ.dr. Sebastian-Claudiu Simu



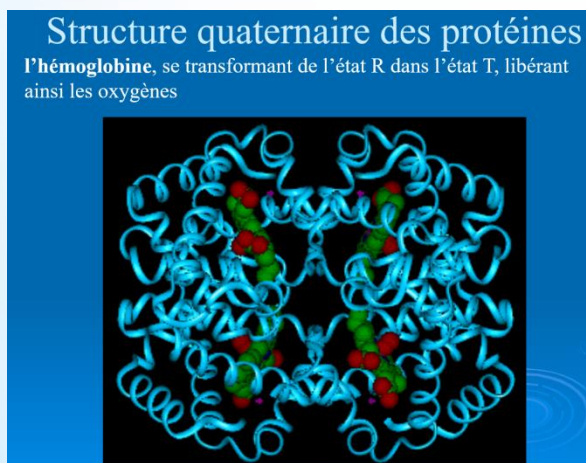
Que voulons-nous apprendre après ce cours ?

- Assurer une base théorique solide et de développer des habilités pratiques sur la recherche du médicament, dans l'étape préclinique et d'identification d'une série de structures moléculaires ayant le potentiel de devenir des substances d'usage pharmaceutique /biomédical.
- Accumuler des notions de base nécessaire à la compréhension de la ration du projet du médicament;
- Familiarisation de l'étudiant pharmacien avec l'utilisation d'une série de logiciels spécifiques au domaine "drug design";
- Développement des habilités de construire et d'interpréter un modèle QSAR, de connaître les modalités d'identification correcte des interactions physiques favorables et défavorables entre le médicament et le récepteur.

LA QUANTIFICATION NUMERIQUE DE L'ACTIVITE BIOLOGIQUE ET DE LA STRUCTURE MOLECULAIRE



STRUCTURE DES BIOMACROMOLECULES



Le contenu des cours:

LE PARADIGME CENTRAL DU QSAR

Activité biologique – d'habitude

➤ Influence d'un xénobiotique sur un organisme

• **xénobiotique**

- une substance qui d'habitude n'est pas une composante de l'organisme exposé à son action
- une substance qui se trouve dans un organisme, mais qui n'est pas normalement produite par celui-ci, ou dont on ne suppose pas sa présence dans l'organisme
 - comprend **la plupart des médicaments** (autres que les composés qui apparaissent naturellement dans l'organisme)
 - de même, autres substances étrangères de l'organisme

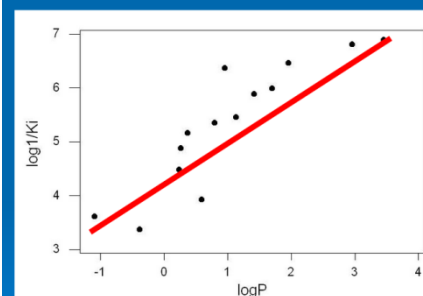
➤ Termes similaires ou apparentés

- endogène**: originaire du ou produit par un organisme, tissu ou cellule
- exogène**: dérivé ou développé de l'extérieur du corps; originaire de l'extérieur

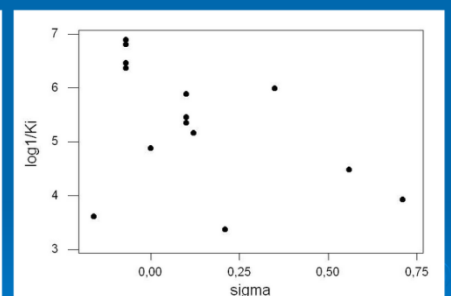
L'ETABLISSEMENT DU MODELE QSAR PAR ANALYSE REGRESSION LINEAIRE

Analyse graphique des données

➤ Interprétations préliminaires



L'hydrophobicité (logP) présente une possible corrélation linéaire



Il n'existe pas de corrélation entre l'activité et les valeurs σ_m

Bibliographie obligatoire :

- Cours de Projet du Médicament - support en format électronique disponible sur <https://moodle.umft.ro/>
- Amjesh R., Principes fondamentaux du QSAR, Editura Editions Notre Savoir, 2021

Bibliographie facultative :

- Kunal Roy, Supratik Kar, Rudra Narayan Das, Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment, Academic Press, 2015
- Kunal Roy (editor), Advances in QSAR Modeling - Applications in Pharmaceutical, Chemical, Food, Agricultural and Environmental Sciences, Springer Cham, 2018