

# PRINCIPES DE STRUCTURE DE CONCEPTION ET AMARRAGE MOLÉCULAIRE



## Adressabilité du cours

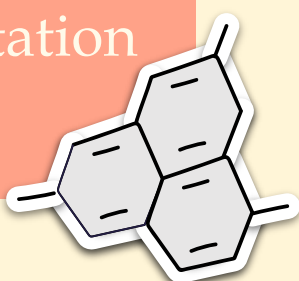
Le cours s'adresse aux étudiants de **deuxième** année du programme d'études en pharmacie.



Source de l'image: <https://storyset.com/>

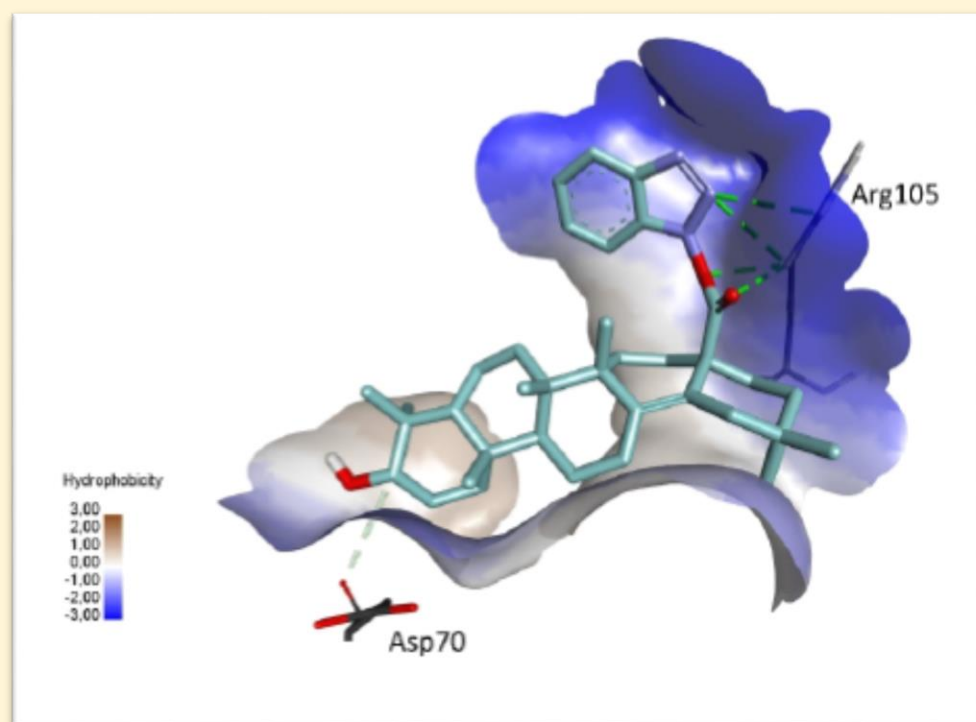
## Contenu du cours

1. Premiers pas avec l'amarrage moléculaire et le filtrage virtuel
2. Façons de représenter l'identité des composés chimiques. Paramètres 2D des composés chimiques.
3. Ligands. Génération de structures moléculaires 2D et 3D. Optimisation des structures 3D.
4. Protéines cibles. Traitement des protéines en tant que structures appropriées pour l'amarrage. Bases de données de jambes de force protéiques 3D.
5. Principes de l'amarrage moléculaire rigide. Programmes d'amarrage moléculaire. Fonctions de score
6. Notions générales sur l'interaction protéine-ligand
7. Interprétation et représentation graphique des résultats.

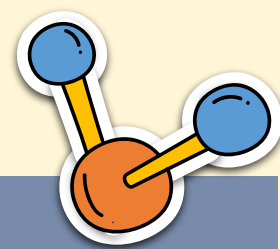


## But du cours

Le cours offre la possibilité d'accumuler les connaissances théoriques nécessaires à son propre développement professionnel, en particulier dans le domaine du développement de nouveaux médicaments.



## Compétences acquises



1. capacité d'utiliser l'expertise dans de nouveaux contextes
2. la capacité d'identifier, d'analyser et de résoudre de nouveaux événements afin d'optimiser le processus de sélection de nouvelles molécules à potentiel pharmacologique
3. développer le rôle de spécialiste dans le domaine de la médecine
4. propre perfectionnement professionnel