

UE-L

Intitulé : Relations structure-activité

Enseignants : Françoise Heymans, Nawal Serradji

Résumé du programme :

Cette UE est destinée à sensibiliser les étudiants aux liens entre la structure chimique d'une molécule et son activité biologique selon deux approches :

-une approche qualitative qui répertorie les groupements responsables de l'activité ou du transport

-une approche quantitative à l'aide des statistiques et de l'informatique qui prend en compte les paramètres physicochimiques de la molécule et de ses substituants éventuels (lipophilie, effets stériques, effets électroniques...) dont l'objectif est soit d'optimiser son activité, soit de diminuer sa toxicité.

Cette UE s'appuie sur de nombreux exemples de la littérature pour aboutir à la lecture intelligente de tableaux de données et à l'interprétation d'équations.

Compétences visées :

Analyse et interprétation de résultats publiés dans la littérature.

Nombre de crédits et coefficient de l'UE : 3 ECTS

Modalités d'évaluation (CC, examen final...) : analyse d'un article et présentation orale associée (30%). Examen final (70%).

UE-M

Intitulé : Modélisation moléculaire de molécules biologiquement actives (M2)

Enseignants : Florent Barbault, George Dive, François Maurel

Résumé du programme :

Cette UE s'inscrit dans la continuité de l'UE de M1 "aspects fondamentaux de la modélisation moléculaire". Un accent particulier est mis sur la conception de molécules biologiquement actives à l'aide de la modélisation moléculaire. Dans ce cadre, les deux principales stratégies seront présentées, à savoir l'approche basée sur les informations du ligand (ligand based) tels que le QSAR 2D et 3D (CoMFA & CoMSIA) et l'approche basée sur les informations de la cible (structure based) tels que les méthodes de docking moléculaire, de dynamique (newtonienne, mode normaux, MMPBSA...). L'ensemble de ces méthodes générant de grands ensembles de données, les analyses statistiques tels que l'analyse de nuées (cluster) et les moindres carrés partiels (PLS) seront abordés. L'ensemble des cours sera abondamment illustré d'exemples pris dans la littérature

Compétences visées :

L'objectif de cet enseignement est de donner aux étudiants la capacité à poser, résoudre et critiquer un projet de modélisation pour la conception de molécules biologiquement actives.

Nombre de crédits et coefficient de l'UE : 6 ECTS

Modalités d'évaluation : Contrôle continu 25% et examen final 75%

UE-K

Intitulé : Synthèses Totales

Enseignants : Chang-Zhi Dong

Résumé du programme :

Les produits organiques naturels se trouvent dans tous les domaines de la vie quotidienne. Certains sont naturellement abondants ; mais d'autres sont plus rares. L'obtention de ces derniers, lorsqu'ils présentent un intérêt économique, est réalisée par « synthèse totale ».

L'objectif de cet enseignement consiste à introduire les grands principes à suivre dans la stratégie de conception d'une voie de synthèse pour l'obtention d'un produit naturel. Pour ce faire, nous nous appuyons sur une analyse rétro-synthétique en mettant l'accent sur l'importance de la polarité des liaisons qui existe dans la molécule à obtenir. Les exemples sont donnés du plus simple au plus complexe ; les composés naturels ayant une application biomédicale sont privilégiés.

Compétences visées :

En fin de formation, les étudiants devraient acquérir une certaine indépendance dans la conception de synthèses de composés organiques relativement complexes, en tenant compte de la chimio-sélectivité, la régiosélectivité et la stéréosélectivité. Ils auront également une meilleure connaissance sur, non seulement, les réactions classiques, mais aussi sur celles développées les dernières décennies et leurs applications en synthèse totale.

Nombre de crédits et coefficient de l'UE : 3 ECTS

Modalités d'évaluation (CC, examen final...) : Contrôle continu 30% et examen final 70%