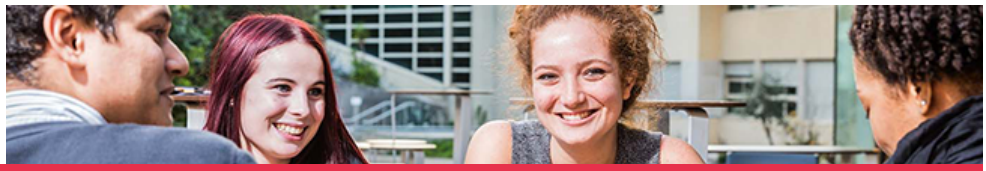

Chemoinformatique

Niveau d'étude
BAC +5

ECTS
2 crédits

Composante
Faculté des Sciences

En bref

- **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- **Langue(s) d'enseignement:** Français
- **Méthode d'enseignement:** En présence
- **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

Présentation

Description

Les thématiques de l'UE sont les suivantes :

Une partie théorique dédiée à la chemoinformatique

Une partie théorique dédiée plus spécifiquement aux outils de modélisation pour le drug-design

Volumes horaires* :

CM : 15 H

TD : 5 H

Une partie dédiée à l'aspect pratique avec un travail sur ordinateurs

Objectifs

A partir de connaissances sur les interactions moléculaires, d'éléments de biochimie et biologie structurale, l'objectif est de donner aux étudiants une expérience pratique sur postes de travail en Chemoinformatique et en modélisation moléculaire. Les limitations et les possibilités de plusieurs logiciels seront ainsi appréhendées.

Pré-requis nécessaires

Une licence en chimie ou biologie

Contrôle des connaissances

Contrôle écrit terminal de 2H.

Syllabus

1. **CHEMICAL MOLECULE**
Representation and research of structures and substructures.

Similarity search (2D / 3D), clustering and diversity analysis.

Search of chemical molecules in patent databases or chemical reactions.

1. **ENERGY INTERACTIONS**

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 28 novembre 2023

Molecular interactions, docking, molecular mechanics, molecular dynamics. Qasr 3D, ADMET.

Notions of structural biology of macromolecules.

3.Structure and Ligand based drug design.

Introduction to Fragment based drug-design.

TD : 5H

Several case studies will be possible :

Design of a virtual library to inhibit protein-protein interactions.

Kinase inhibitors, design and medicinal chemistry

Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Christine ENJALBAL-GOUBET

christine.enjalbal-goubet@umontpellier.fr

Responsable pédagogique

Alain Chavanieu

Lieu(x)

- Montpellier - Triolet

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 28 novembre 2023