

## Molécules et Médicaments *de la conception au développement*

### 3 INTERVENANTS

- Laure HABERKORN

*Institut de R&D SERVIER – Paris-Saclay*

- Yann LAMOTTE

*Oncodesign – Les Ulis*

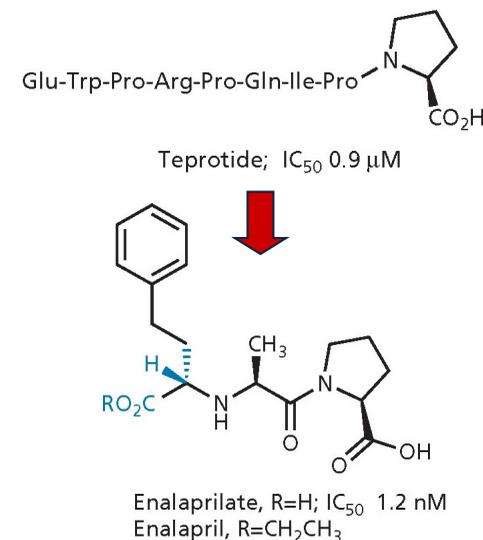
- Philippe DAUBAN

*Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS*

## Chimie Médicinale

### Introduction et principes généraux

- Introduction : le développement pharmaceutique
  - > *Comprendre pourquoi 1 molécule sur 100.000 devient un médicament*
- Nature des interactions molécule-cible
  - > *Comprendre comment agit un principe actif au niveau moléculaire*
- « Drug Discovery »
  - > *Comprendre l'origine des têtes de série ou « leads »*
- « Drug Design »
  - > *Comprendre comment transformer la tête de série en candidat médicament*
  - Propriétés pharmacodynamiques, pharmacocinétiques, prodrogues*
- Chimie médicinale : Développements en chimie organique
  - > *La créativité du chimiste organicien au service de la chimie médicinale*
  - Fluor, Méthyle, Nouveaux motifs (oxétane, cyclopropane, escape from flatland)*
- Catalytic C-H Functionalization en chimie médicinale
  - > *Catalytic C-H Functionalization by C-H Activation (inner-sphere mechanism)*
  - > *Catalytic C-H Functionalization by C-H Insertion (outer-sphere mechanism)*
  - > *Catalytic C-H Functionalization using radicals*
  - > *Application of catalytic C-H functionalization*

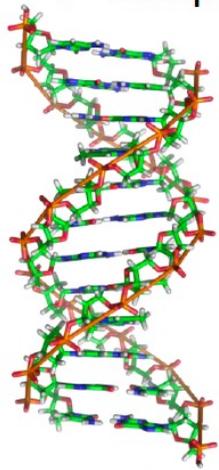


# Molécules et Médicaments: *Partie 2* (L. Haberkorn)

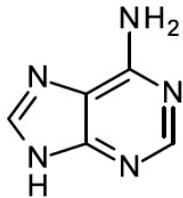
## • Top 10 US Pharmaceuticals (2022)

Rank	Drug Name	Indication	Revenue (Billion \$)
1	Comirnaty (COVID-19 Vaccine)	Infectious Diseases	\$37.806
2	Humira (Adalimumab)	Immunology	\$21.237
3	Keytruda (Pembrolizumab)	Oncology	\$20.937
4	Paxlovid (Ritonavir/Nirmatrelvir)	Infectious Diseases	\$18.933
5	Spikevax (CX-02414)	Infectious Diseases	\$18.435
6	Eliquis (Apixaban)	Cardiology/Vascular Diseases	\$11.789
7	Biktarvy (Bictegravir/Emtricitabine/Fenofibrate Atalenamide)	Infectious Diseases	\$10.390
8	Revlimid (Lenalidomide)	Oncology	\$9.978
9	Stelara (Ustekinumab)	Immunology	\$9.723
10	Eylea (Aflibercept)	Ophthalmology	\$9.639

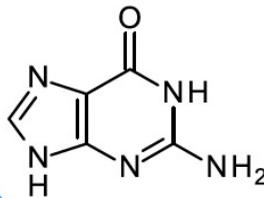
➤ composants majoritaires des molécules biologiques comme l'ADN et l'ARN



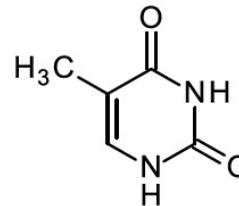
Double hélice



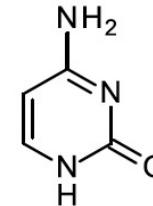
Adénine



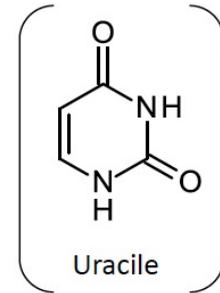
Guanine



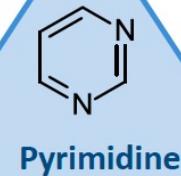
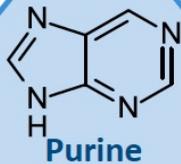
Thymine



Cytosine

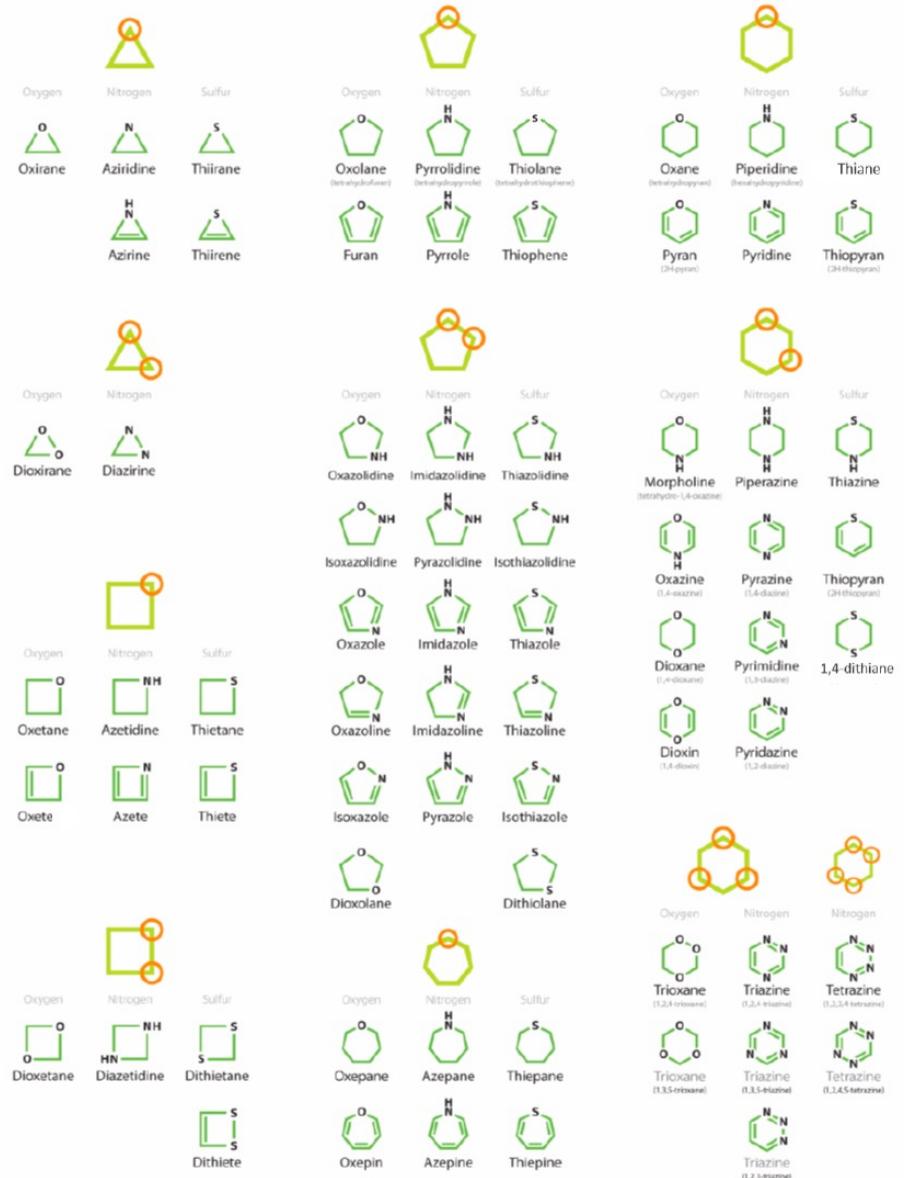


Uracile



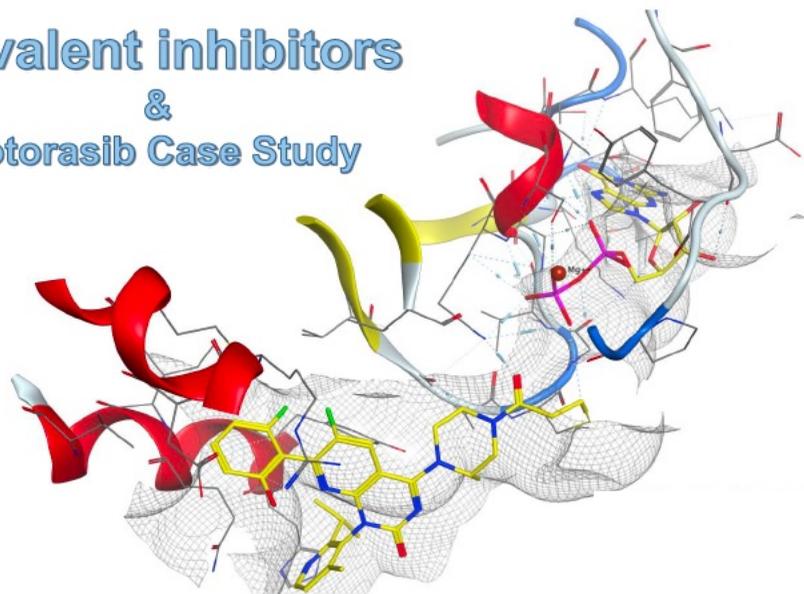
# Molécules et Médicaments: *Partie 2 (L. Haberkorn)*

- Introduction
- Nomenclature des hétérocycles
- Les hétérocycles en Chimie Médicinale
- Les hétérocycles à 3 chaînons
- Les hétérocycles à 4 chaînons
- Les hétérocycles à 5 chaînons
- Les hétérocycles à 6 chaînons
- Les hétérocycles à >6 chaînons

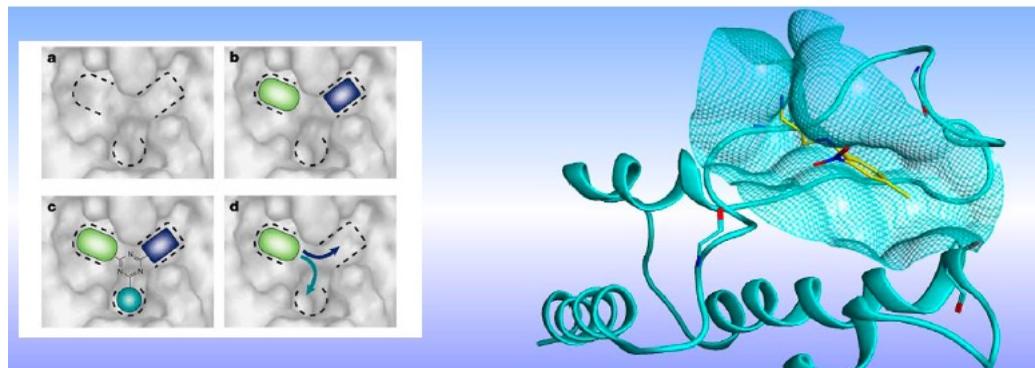


# Molécules et Médicaments: *Partie 3* (Y. Lamotte)

## Covalent inhibitors & Sotorasib Case Study



## Fragment Based Drug Design



## AI in Drug Discovery

The view of a medicinal  
chemist

