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

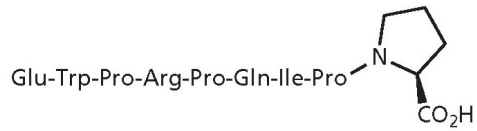
Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS

université PARIS-SACLAY

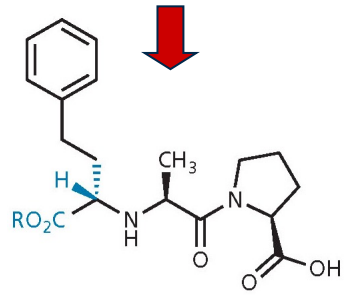
Chimie Médicinale

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



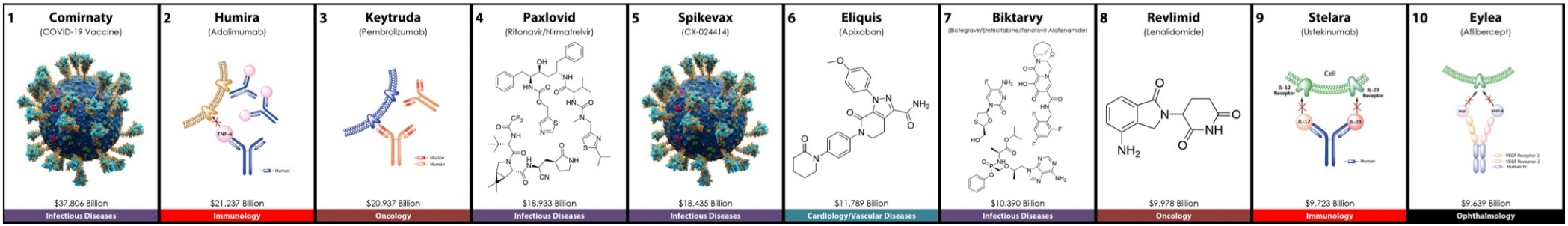
Teprotide; IC_{50} 0.9 μM



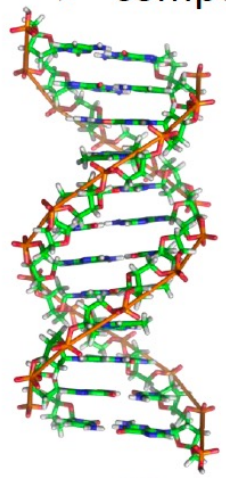
Enalaprilate, R=H; IC_{50} 1.2 nM
Enalapril, R=CH_2CH_3

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

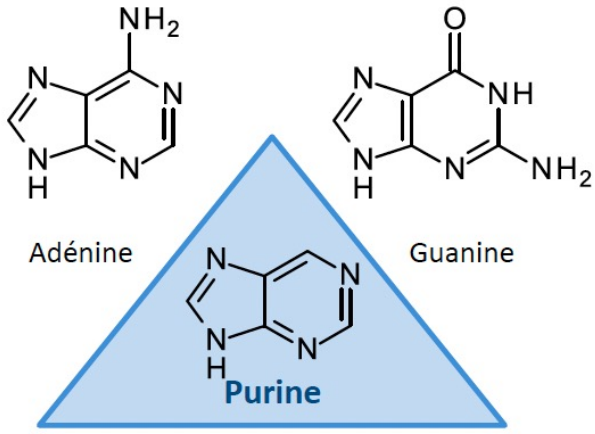
- Top 10 US Pharmaceuticals (2022)

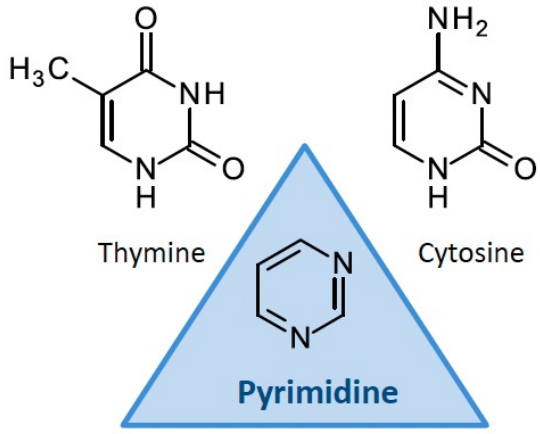


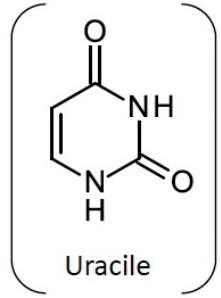
➢ composants majoritaires des molécules biologiques comme l'ADN et l'ARN



Double hélice

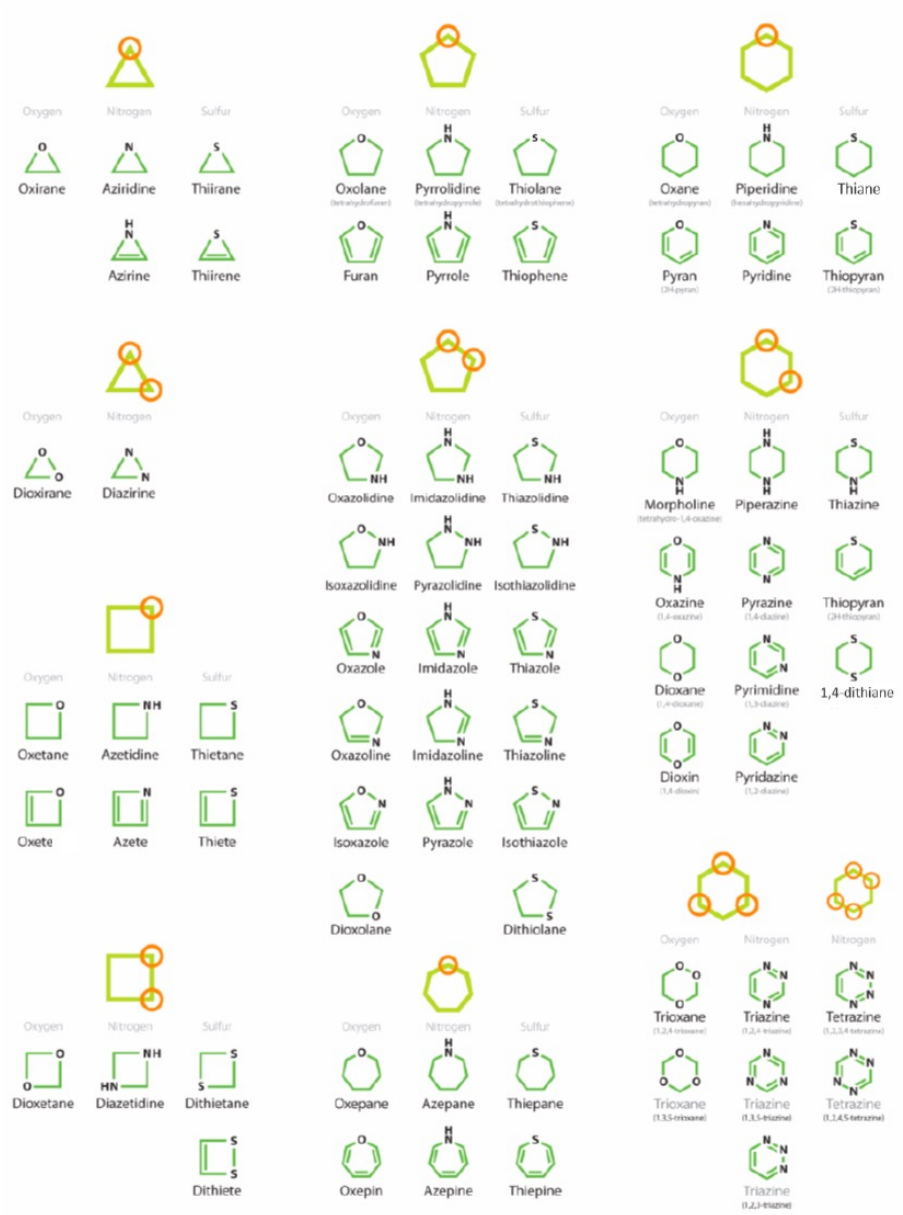






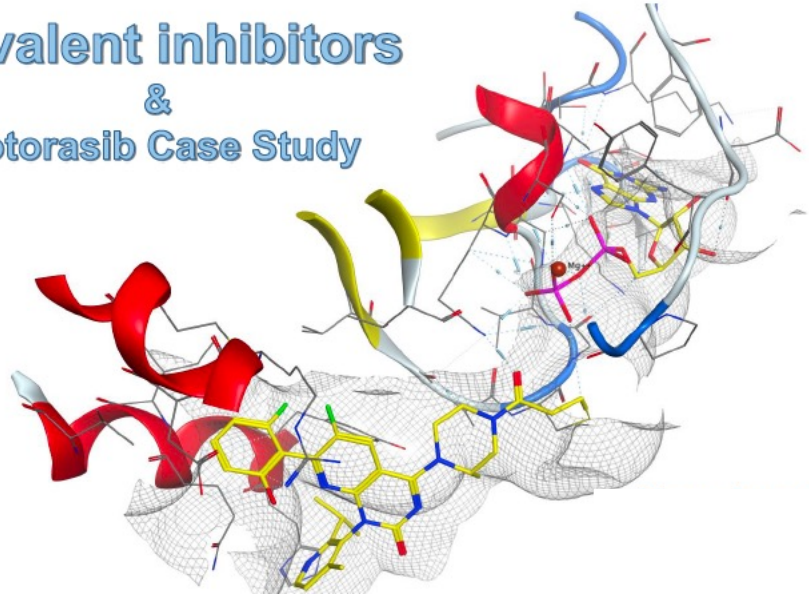
Molécules et Médicaments: *Partie 2 (L. Haberkorn)*

- ❑ 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

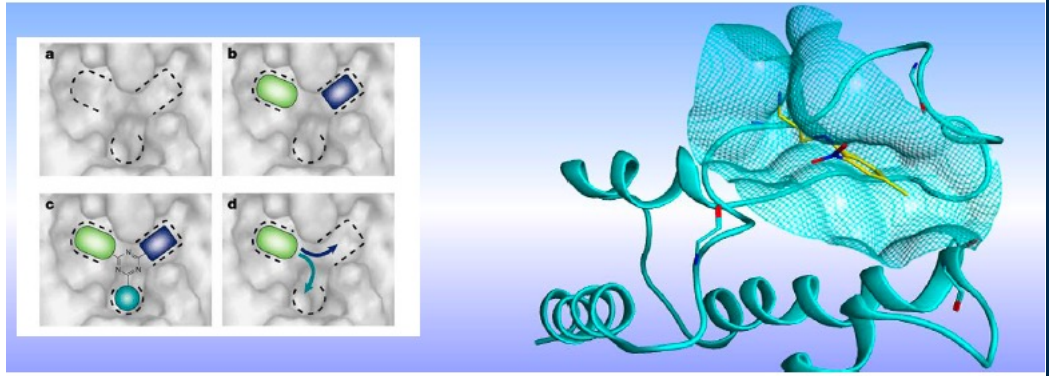


Molécules et Médicaments: *Partie 3 (Y. Lamotte)*

Covalent inhibitors & Sotorasib Case Study



Fragment Based Drug Design



AI in Drug Discovery - The view of a medicinal chemist