



# Cheminformatique



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

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 Cheminformatique et en modélisation moléculaire. Les limitations et les possibilités de plusieurs logiciels seront ainsi appréhendées.

## 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

### 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



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](mailto:christine.enjalbal-goubet@umontpellier.fr)

#### Responsable pédagogique

Alain Chavanieu

---

### Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet