

MASTER BIO-INFORMATIQUE (2022-2023)
M1 Parcours Recherche ISDD :
Design des molécules bioactives (diplôme français ou double diplôme franco-italien)

SEMESTRE S1 UNIVERSITE STRASBOURG (30 ECTS)

BQ1AY010 METHODOLOGIE (10 ECTS)
Responsables : G. MARCOU, DALBAVIE J. O., GIUSEPPONE N.

Intitulé : Méthodologie

Responsable pédagogique : G. Marcou, J.O. Dalbavie, N. Giuseppone

Programme : Systèmes d'exploitation et réseaux

Composants et périphériques d'un PC. L'environnement DOS/Windows7/Linux. Administration. Principes des systèmes d'exploitation. Interfaces de commandes et scripts d'automatisation. Réseaux locaux, TCP/IP. Scripts shell: le bash

Compétences visées :

Démontage/remontage de matériel. Installation système. Réseaux. Sécurité Écrire et exécuter un script

Programme : Méthodes statistiques

Statistiques descriptives, Tests statistiques, Analyse de variance à un facteur, Régression simple et multiple, Régression pas à pas, Analyse en Composantes Principales, Méthodes avancées: Partial Least Square (PLS) et Régression Logistique.

Compétences visées :

Mise en oeuvre dans des cas concrets en chimie. Utilisation de EXCEL pour l'analyse statistique.

Programme : Chimie organique

Généralités sur les composés organiques. Liaisons, conformations, stéréochimie. Réactions et mécanismes réactionnels. Alcanes, alcènes, alcynes et hydrocarbures cycliques. Dérivés halogénés. Alcools, époxydes, éther oxydes, thiols, thioéthers, amines. Aldéhydes, cétones, acides carboxyliques et dérivés. Arènes.

BQ1AY020 MODELISATION MOLECULAIRE (8 ECTS)
Responsable : R. SCHURHAMMER

Intitulé : Modélisation moléculaire

Responsable pédagogique : R. Schurhammer

Programme : Modélisation Moléculaire

Introduire trois approches complémentaires de la modélisation des architectures moléculaires : investigations dans des bases de données, construction et minimisation par des méthodes de champ de force, et mécanique quantique.

Compétences visées :

Méthodes de champ de force. Utilisation de bases de données structurales. Aperçu des méthodes de chimie quantique.

Programme : TP de Modélisation

Modélisation de structure et de propriétés de molécules organiques (chimie quantique, mécanique et dynamique moléculaire, chemoinformatique). Logiciels de modélisation.

Compétences visées :

Échantillonnage conformationnel. Calculs théoriques de paramètres de molécules. Recherche structurale dans la base CCDC.

Programme : Introduction à la Chimie Thérapeutique

Connaissances et objectifs partagés par les chimistes, phytochimistes et biologistes concernant les substances actives. Nature chimique et génèse des substances actives. Propriétés physico-chimiques et métabolisation des substances actives. Production. Contrôle. Le monde du médicament.

Compétences visées :

Stratégies et méthodes d'identification et d'optimisation des substances actives. Industrie pharmaceutique et R&D.

BQ1AY030 CHEMOINFORMATIQUE (10 ECTS)

Responsable : A. VARNEK

Intitulé : Chemoinformatique

Responsable pédagogique : A. Varnek

Programme I :

Représentation de structures par ordinateur (1D, 2D, 3D). Eléments de théorie de graphes. Chaînes SMILES et InChi. Empreintes moléculaires. Pharmacophores. Formats MOL, SDF, RXN et RDF. Recherche structurale et sous-structurale. Analyse conformationnelle. Similarité et diversité de molécules.

Compétences visées :

Créer/gérer des données chimiques en utilisant les logiciels commerciaux. Traitement, création de données chimiques.

Programme II :

Descripteurs moléculaires (1D, 2D, 3D). Méthodes structure-activité (QSAR/QSPR). QSAR en 3D : analyse comparative de champs moléculaires ("CoMFA "). Criblage virtuel et design « *in silico* » de nouveaux composés. Filtrage. Docking.

Compétences visées :

Etre capable de sélectionner des descripteurs pertinents, d'obtenir de modèles QSAR et de les utiliser pour un criblage virtuel.

Programme : Diversité Chimique *In silico*

Bases de données en chimie. Similarité et diversité de molécules. Espace chimique. Méthodes de clustering. Préparation de jeux de données divers. Génération de chimiothèques combinatoires Compé-

tences visées :

Créer et gérer une base de données chimique. En analyser qualitativement le contenu. Proposer de "nouveaux" composés.

BQ1AU040 COMMUNICATION (2 ECTS)

Responsable :

Intitulé : Communication

Responsable pédagogique :

Programme : Anglais disciplinaire

Stage d'anglais intensif au début du semestre soutenu par des conférences et des devoirs en anglais. Compréhension, expression, prononciation. + Autoformation à l'anglais guidée lors de laquelle les étudiants utilisent des ressources sur Internet ou les ressources installées sur les ordinateurs.

Compétences visées :

Comprendre des articles et des conférences en anglais. Maîtrise du sens de mots utilisés. Prononciation intelligible.

Programme : Conférences

Cycles de conférences donnés par des chercheurs renommés et des industriels. Exemples : Artem Cherkasov (Vancouver, Canada), Alexandre Tropsha (Chapel Hill, USA), Joao Aires de Susa (Lisbonne), Markus Gastreich (BiosolvIT), Philippe Vayer (Servier).

Compétences visées :

Posséder un regard objectif sur l'état des connaissances en Chemoinformatique et en Drug Design.

Programme : Présentation d'articles

Travail bibliographique et analyse d'articles

SEMESTRE S2 UNIVERSITY DEGLI STUDI DI MILANO (30 ECTS)

BQ1BY010 PROGRAMMING IN C (6 ECTS)

Coordinator : C. LORENZO

Title : Programming in C

Teaching coordinator : C. Lorenzo

Program :

Basic aspect of C programming. Language for numerical analysis and statistics purposes. Generalities about programming languages. Source files and executable files. Compilers. Variable types. Input-output operations. While and for loops. Conditional constructs. Pointers. Array manipulation. String manipulation.

Targeted skills :

To be able to write and execute simple codes in C

BQ1BY020 STRUCTURAL BIOLOGY AND ENZYMOLOGY (6 ECTS)
--

Coordinator : M. VANONI

Title : Structural Biology and Enzymology

Teaching coordinator : M. Vanoni

Program :

Structural Biology and Enzymology Introduction to the identification of drug molecular targets by bioinformatic, genomic, transcriptomic, and proteomic techniques. Criteria for the validation of pharmacological targets. Molecular recognition and nature of ligand binding sites. Structure-function
Synthetic Techniques Applied to the Design and Synthesis of Biologically Active Principles Expanded role of chemistry in all the phases spanning through the initial concept idea, the rational design, the synthesis and the structural optimization of a pharmacologically active molecule.

Targeted skills :

Understand concepts in Structural Biology and Enzymology and in rational design, synthesis and structural optimization of a pharmacologically active molecule.

BQ1BY030 MEDICINAL CHEMISTRY (6 ECTS)
Coordinators: L. BELVISI

Title : Medicinal chemistry

Teaching coordinators : L. Belvisi

Program:

Principal phases of drug action. Pharmacokinetics: Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion of drugs. Pharmacodynamics: the molecular targets of drugs and the receptor concept. Principal phases of drug discovery and development process. LEAD identification.

Targeted skills :

Knowledge on Principal phases of drug action

BQ1BY040 SIMULATION, MODELLING AND BIOMOLECULES (6 ECTS)
Coordinator : S. PIERACCINI

Title : Simulation, modelling and biomolecules

Teaching coordinator : S. Pieraccini

Program:

Molecular mechanics principles. The concept of atom type. Force fields functional form. Molecular dynamics. Integration of newton equations. Periodic boundary conditions. Calculation of non bonded terms. Setup of an MD simulation. The sampling problem. Application to the protein folding problem

Targeted skills :

Learning principles of Molecular modeling for Biomolecules, molecular dynamic and sampling simulation

BQ1BU050 BIOACTIVE MOLECULES (6 ECTS)
Coordinator : L. BELVISI

BQ1BY050 Synthetic methods in Biotechnology ou CHIM06 (6 ECTS)
Coordinator : L. BELVISI

Ou

BQ1BE060 Bioinformatics & language (6 ECTS) (si semestre Erasmus- diplôme français)