

**Journée Nationale en Chemoinformatique
23 mars 2007, ULP Strasbourg**

***Approches structurales pour la conception de
principes actifs
« Structure-based drug design »***

**Sinan Arnaud Karaboga : CIFRE Fournier/ULP
Jérôme Amaudrut
Luc Spitzer
Michel Souchet**

**Laboratoires
Fournier**



SOLVAY

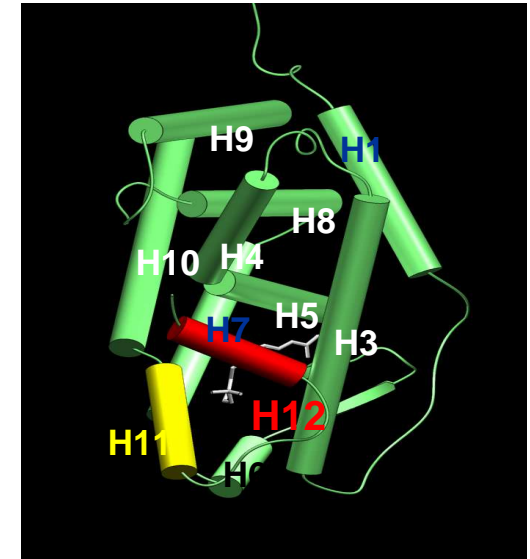
Recherche de nouveaux principes actifs

- ◆ **Cible biologique**

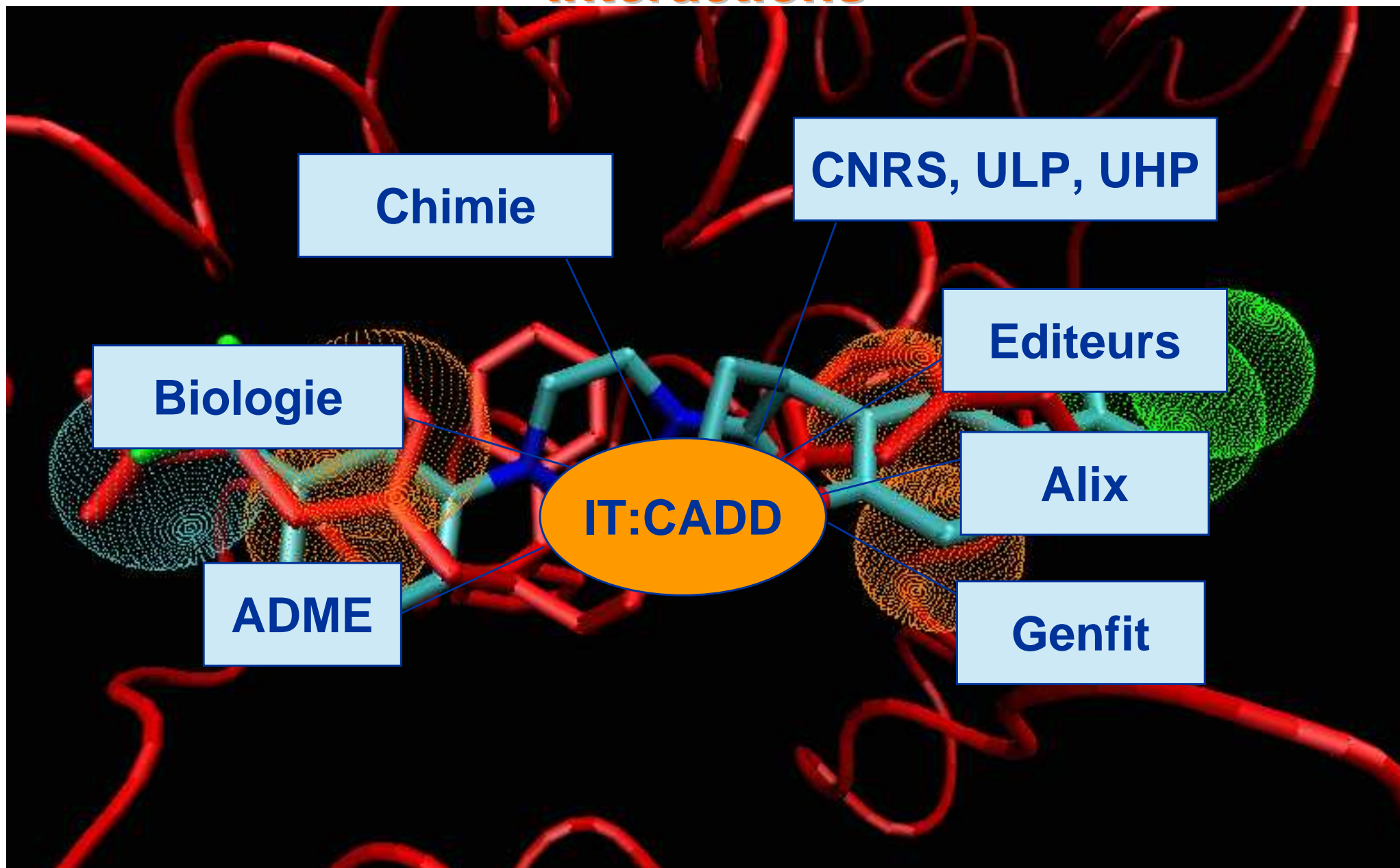
- ◆ Récepteurs nucléaires

- ◆ **Cahier des charges du principe actif**

- ◆ Doit être bien absorbé
- ◆ Doit atteindre sa cible biologique
- ◆ Ne doit pas être trop métabolisé
- ◆ Doit être excrété et non toxique
- ◆ Ne doit pas interagir avec d'autres médicaments



Groupes de recherche internes et externes : Interactions



Méthodes et Outils 1/2

- ◆ **Base de données chimiques**
 - MDL/Isis
 - Accelrys/Catalyst

- ◆ **Calcul de propriétés phys.chem./ADME et fingerprints**
 - ACDlabs
 - MDL/Isis
 - Scitegic/Pipeline Pilot
 - Metasite

- ◆ **Pharmacophore/criblage virtuel**
 - Accelrys/Catalyst

Méthodes et Outils 2/2

◆ Docking

- Accelrys/LigandFit
- Schrödinger/Glide

◆ Modélisation par homologie

- Accelrys/InsightII/DS
- Schrödinger/Prime

Fournier-Solvay Pharma



Solvay Hannover



Laboratoires Fournier Daix



Solvay Weesp

<http://www.groupe-fournier.com/>

<http://www.solvaypharmaceuticals.com/homepage/>

michel.souchet@solvay.com

Integrative Approach for Drug Discovery

