# BNF201 - Bio-informatique structurale, drug design

Mis à jour le 23-02-2026

## Code : BNF201

Unité d'enseignement de type cours

6 crédits

Volume horaire de référence (+/- 10%) : **50 heures**

**Responsabilité nationale :** EPN07 - Chimie Vivant Santé / Jean-François ZAGURY

**Contact national :**

Bioinformatique

17.0.16, 292 rue St Martin
75003 Paris

Isabelle Corbeau
isabelle.corbeau@lecnam.net

# Présentation

## Prérequis

Le public concerné est typiquement constitué des biologistes/biochimistes et chimistes de l'industrie pharmaceutique et des sociétés de biotechnologie, ou d'étudiants qui souhaitent s'orienter vers ces industries. Les informaticiens souhaitant se tourner vers le monde biomédical pourront aussi être intéressés.
Accès : Titulaires d'un Bac + 3 ou équivalent dans le domaine biomédical (p.e. licence de biologie, de biochimie ou de chimie), ou personnes ayant déjà suivi et réussi l'UE BNF104 du CNAM.

## Objectifs pédagogiques

Former des biologistes/bio-informaticiens connaissant les outils du drug design et de la modélisation moléculaire afin d'être capable de participer ou d'orienter efficacement des recherches à visée pharmaceutique (fabrication de médicaments)

## Compétences

Connaitre les outils actuels qui permettent de faciliter le design in silico de médicaments afin que l'auditeur puisse être performant dans un projet à visée pharmaceutique soit comme coordinateur soit comme assistant autonome

# Programme

## Contenu

Rappels sur les relations structure/fonction des protéines
Représentation 3D des protéines.
Mécanique moléculaire. Visualisation des structures de protéines et prédiction de leur structure secondaire et de leur structure 3D.
Petites Molécules et chimiothèques
Descripteurs moléculaires  ADME-Tox
Ligand-based drug design, Structure-based drug design
Analyse et exploitation des résultats de criblage in silico.

## Modalités de validation

- Examen final

## Description des modalités de validation

examen final

## Bibliographie

| Titre | Auteur(s) |
|---|---|
| Molecular modeling, principles and applications | Andrew Leach |
| Virtual screening in drug discovery | Juan Alvarez and Brian Shoichet |