

# Rational drug design and PKPD modeling

## Titulaires

Jean-Christophe LELOUP (Coordonnateur) et Martine PREVOST

## Mnémonique du cours

CHIM-F4001

## Crédits ECTS

5 crédits

## Langue(s) d'enseignement

Anglais

## Période du cours

Deuxième quadrimestre

## Campus

Plaine

## Contenu du cours

Part I: Rational Drug Design

Content:

I Introduction

- > History in the art of healing and drug discovery
- > Main contributing sources to drugs
- > Lead discovery and optimization

II Experimental approaches

- > High throughput screening
- > Combinatorial chemistry
- > High throughput Xray cristallography and NMR

III Computer-assisted methods

- > Ligand-based rational design: QSAR and pharmacophore and similarity-based virtual screening
- > Structure (or receptor)-based rational design: Virtual screening of 3D structure of ligand in the 3D structures of receptors, fragment-based (or de novo) design
- > Scoring functions to estimate the free energy of binding receptor-ligand
- > Applications

Part II: PK/PD modelling

Content:

- > ADME properties:
- > Absorption

- > Distribution
- > Metabolism and Excretion
- > Non-linear Pharmacokinetics
- > Designing Dose Regimens
- > PK/PD Modelling

## Objectifs (et/ou acquis d'apprentissages spécifiques)

Part I: Rational Drug Design

Introducing the computer-assisted and experimental methods used in rational drug design and detailing both the ligand-based and structure-based approaches. Part II: PK/PD modelling

Part II: PK/PD modelling

Introducing the students to the concept of mathematical modelling in pharmacokinetics and pharmacodynamics to describe and predict the time course of drug effects under various conditions.

## Méthodes d'enseignement et activités d'apprentissages

Courses and practical exercises illustrated by applications from the literature.

## Contribution au profil d'enseignement

Introducing different aspects of rational drug design and of the pharmacodynamic and pharmacokinetic properties of drugs

## Autres renseignements

### Lieu(x) d'enseignement

Plaine

### Contact(s)

Campus Plaine bâtiment BC niveau 4 1C4.104  
mprevost@ulb.ac.be

## Méthode(s) d'évaluation

Autre

### Méthode(s) d'évaluation (complément)

Mark based on:

- > Oral exam in two parts: on the RDD and on the PK/PD modelling

> Written report on the practical exercises

Construction de la note (en ce compris, la pondération des notes partielles)

oral exam: 80%

written report: 20%

Langue(s) d'évaluation principale(s)

Français et Anglais

## Programmes

Programmes proposant ce cours à la faculté des Sciences

MA-BINF | **Master en bioinformatique et modélisation** | finalité Approfondie/bloc 2, MA-CHIM | **Master en sciences chimiques** | finalité Approfondie/bloc 1, finalité Didactique/bloc 1 et finalité Spécialisée/bloc 1 et MA-IRBC | **Master : bioingénieur en chimie et bioindustries** | finalité Spécialisée/bloc 2

Programmes proposant ce cours à l'école polytechnique de Bruxelles

MA-IRBC | **Master : bioingénieur en chimie et bioindustries** | finalité Spécialisée/bloc 2 et MA-IRCB | **Master : ingénieur civil biomédical** | finalité Spécialisée/bloc 2

