

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 crystallography 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

