



## MASTER - Chimie

### Design in silico des molécules bioactives

#### Objectifs du parcours

Cette filière de master est une formation à la modélisation de médicaments à l'aide d'approches in silico (chemo- et bio-informatique) pour accélérer la découverte de nouvelles molécules thérapeutiques. Il s'agit d'une formation interdisciplinaire en biochimie, en chimie et en informatique, à vocation européenne. Elle s'appuie sur des semestres dans les universités de Strasbourg, Paris Diderot et Milan. Elle prépare aux métiers de la recherche pour l'innovation thérapeutique et le développement de molécules pharmacologiques.

A partir de la rentrée 2022-23, ce parcours fera partie du Erasmus Mundus Joined Master ChEMoinformaticsPlus.

#### Contacts

- Gilles Marcou : [g.marcou@unistra.fr](mailto:g.marcou@unistra.fr)
- Alexandre Varnek : [varnek@unistra.fr](mailto:varnek@unistra.fr)

|                                 |          |         |         |
|---------------------------------|----------|---------|---------|
| Langue du parcours              | Français |         |         |
| ECTS                            | 120 ECTS |         |         |
| Volume horaire                  |          |         |         |
| TP : 0h                         | TD : 0h  | CI : 0h | CM : 0h |
| Formation initiale              |          | Oui     |         |
| Formation continue              |          | Non     |         |
| Apprentissage                   |          | Non     |         |
| Contrat de professionnalisation |          | Non     |         |

# Master 1 Design in silico des molécules bioactives

## Semestre 1 - Design in silico des molécules bioactives

|                                                                     | ECTS           | CM   | CI   | TD   | TP   | TE   | Stage |
|---------------------------------------------------------------------|----------------|------|------|------|------|------|-------|
| <b>Méthodologie</b>                                                 | <b>10 ECTS</b> |      |      |      |      |      |       |
| Systèmes d'exploitation et réseaux                                  |                |      | 24 h |      |      |      |       |
| Méthodes statistiques                                               |                | 16 h |      | 8 h  |      |      |       |
| Chimie organique                                                    |                |      | 24 h |      |      |      |       |
| <b>Modélisation moléculaire</b>                                     | <b>8 ECTS</b>  |      |      |      |      |      |       |
| Basics of electronic structure calculations and introduction to DFT |                | 18 h |      |      | 9 h  |      |       |
| Molecular modelling                                                 |                | 10 h |      |      | 8 h  |      |       |
| Chemoinformatics                                                    |                | 10 h |      |      | 10 h |      |       |
| Découverte de médicaments                                           |                |      | 20 h | 8 h  |      |      |       |
| <b>Chémoinformatique</b>                                            | <b>10 ECTS</b> |      |      |      |      |      |       |
| Chemoinformatics 1                                                  |                | 16 h |      | 8 h  |      |      |       |
| Chemoinformatics 2                                                  |                | 16 h |      | 8 h  |      |      |       |
| Chemoinformatics 3                                                  |                | 16 h |      | 8 h  |      |      |       |
| <b>Communication</b>                                                | <b>2 ECTS</b>  |      |      |      |      |      |       |
| Anglais - S1 Master                                                 |                |      |      | 16 h |      | 60 h |       |