



CHIMIE MOLÉCULAIRE ET SUPRAMOLÉCULAIRE

MOLECULAR AND SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

Responsable(s): Christelle YEROMONAHOS, Naoufel HADDOUR

| Cours : 12.0 | TD : 18.0 | TP : 0.0 | Autonomie : 18.0 | BE : 0.0 | Projet : 0.0 | Langue du cours : FR

Objectifs de la formation

Les métabolites sont des molécules de bas poids moléculaire, caractéristiques de nombreuses pathologies, mais noyés dans le sang parmi des grosses molécules. Leur détection pour le diagnostic clinique est un challenge. La fonctionnalisation chimique de surface pourrait permettre de capturer sélectivement des métabolites, à partir d'une goutte de sang, et d'augmenter la sensibilité de la détection (spectrométrie de masse).

L'objectif du cours est de comprendre pourquoi certains métabolites ont une affinité particulière avec certaines molécules de fonctionnalisation. Comment effectuer des choix pour modifier la nature chimique de la surface pour sélectionner au mieux les métabolites ciblés.

Mots-clés : Interactions intermoléculaires, simulations de dynamique moléculaire, diagnostic clinique innovant

Programme

Cet enseignement sera présenté sous forme d'une étude de cas.

Dans un premier temps, les propriétés physico-chimiques des molécules uniques seront présentées (structure, balance hydrophile-hydrophobe, charges).

Dans un deuxième temps, les propriétés physico-chimiques des structures supramoléculaires seront analysées à partir des propriétés des molécules uniques qui les constituent par la modélisation moléculaire (énergie d'interactions...).

Les résultats de cette analyse seront employés pour concevoir un outil d'analyse biomédicale.

Compétences

- C2N1 : Définit un système et ses frontières, identifie les phénomènes mis en jeu et propose un modèle simple. Formule les hypothèses.
- C2N3 : Caractérise la complexité d'un système, identifie les interactions et les sources d'incertitude.
- C1I1 : Réalise un état de l'art et met en œuvre des méthodes de créativité, sur un problème ouvert sur des questions techniques-scientifiques-économiques, et formalise le résultat.

Travail en autonomie

Objectifs : Modélisation moléculaire sur ordinateur

Méthodes :

Bibliographie

Franck, *CHIMIE PHARMACEUTIQUE*, De Boeck, 2005
J.-M. Lehn *LA CHIMIE SUPRAMOLÉCULAIRE, CONCEPTS ET PERSPECTIVES*, De Boeck, 1997
Trong Anh *INTRODUCTION À LA CHIMIE MOLÉCULAIRE*, Ellipses, 1994

Contrôle des connaissances

Note = 50% savoir + 50% savoir-faire
Note de savoir = 50% examen terminal + 50% contrôle continu
Note de savoir-faire = 50% examen terminal + 50% contrôle continu