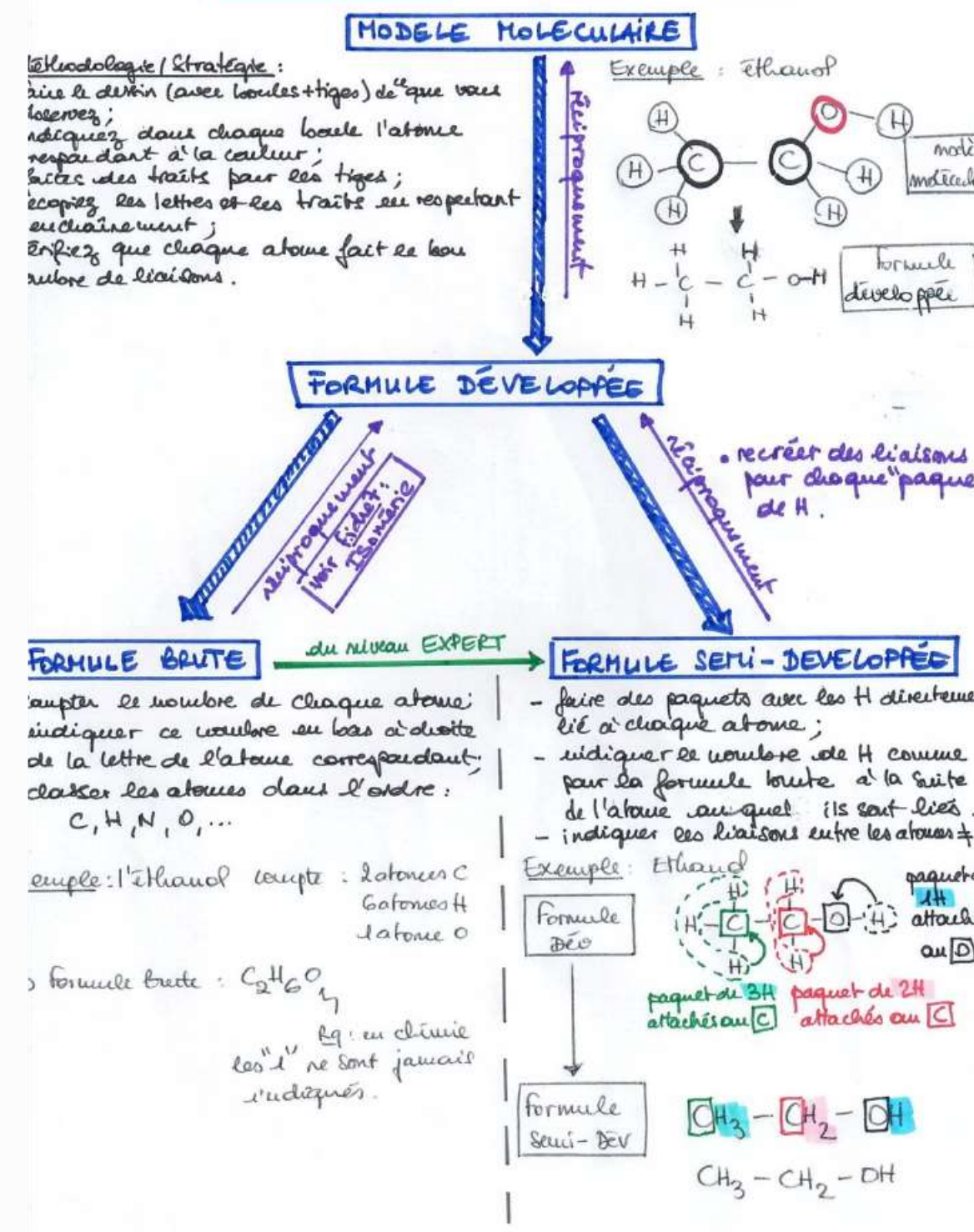


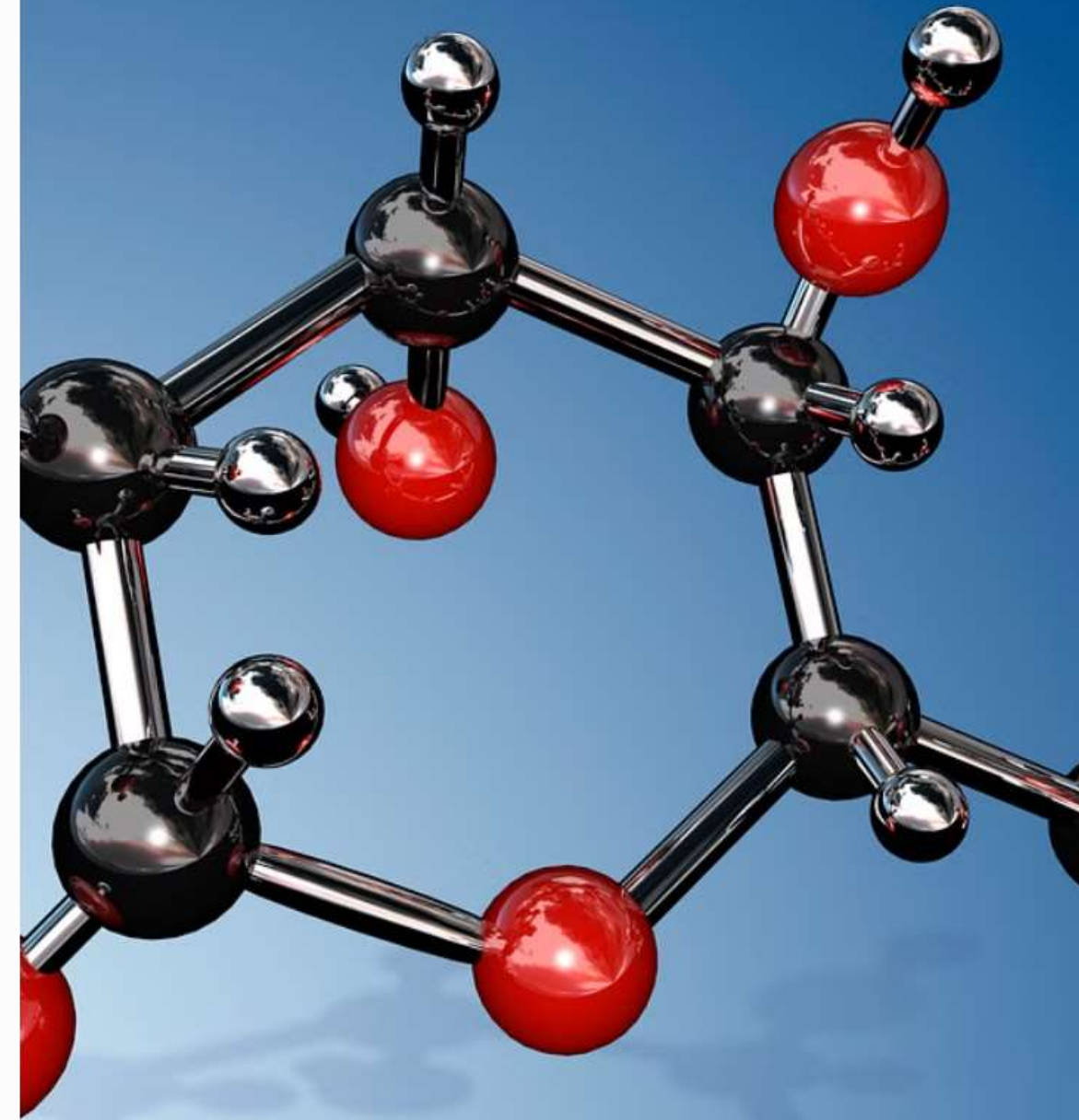
# Découverte de composés tête de série

Découvrir de nouveaux composés chimiques aux propriétés prometteuses est une étape cruciale dans le développement de nouveaux médicaments et produits. Ces composés "tête de série" sont le point de départ pour approfondir la recherche et optimiser leurs fonctions.



# Définition des composés tête de série

Les composés tête de série, aussi appelés « hit » en recherche pharmaceutique, sont des molécules avec un fort potentiel thérapeutique identifiées lors des étapes initiales de découverte de nouveaux médicaments. Ils possèdent des propriétés pharmacologiques intéressantes et constituent le point de départ pour le développement ultérieur de candidats médicaments.



# Importance des composés tête de série dans la recherche pharmaceutique

## 1 Identification de pistes prometteuses

Les composés têtes de série servent de points de départ pour la découverte de nouveaux médicaments en identifiant des pistes prometteuses pour le développement.

## 3 Validation des cibles thérapeutiques

L'étude des composés têtes de série contribue à valider les cibles thérapeutiques et à comprendre les mécanismes d'action des futurs médicaments.

## 2 Optimisation des propriétés

Ils permettent d'optimiser les propriétés physicochimiques et pharmacologiques des candidats médicaments afin d'améliorer leur efficacité et leur sécurité.

## 4 Réduction des risques

Leur utilisation permet de réduire les risques et les coûts associés au développement de nouveaux médicaments en se concentrant sur les molécules les plus prometteuses.





# Méthodes de découverte de nouveaux composés tête de série

## **Criblage à haut débit**

L'utilisation de robots de criblage automatisés permet d'évaluer rapidement des milliers de composés chimiques pour identifier des têtes de série prometteuses.

## **Optimisation des propriétés**

L'ajustement des propriétés physicochimiques, comme la solubilité et la stabilité, améliore les chances de succès des têtes de série.

1

2

3

## **Conception assistée par ordinateur**

Des logiciels de modélisation moléculaire aident à concevoir de nouveaux composés en se basant sur la structure de cibles biologiques connues.

# Criblage à haut débit

Le criblage à haut débit est une méthode puissante pour découvrir de nouveaux composés tête de série dans la recherche pharmaceutique. Cette approche permet d'évaluer rapidement et de manière automatisée des milliers, voire des millions de molécules potentiellement actives contre une cible biologique d'intérêt.

Les robots de criblage et les techniques d'analyse sophistiquées permettent de réaliser ces tests en parallèle à une vitesse et une échelle inégalées, ouvrant la voie à l'identification de nouvelles pistes de développement de médicaments.



# Conception assistée par ordinateur

1

## Modélisation moléculaire

Utiliser des logiciels de simulation pour prédire la structure 3D des molécules et leurs interactions avec les cibles biologiques.

2

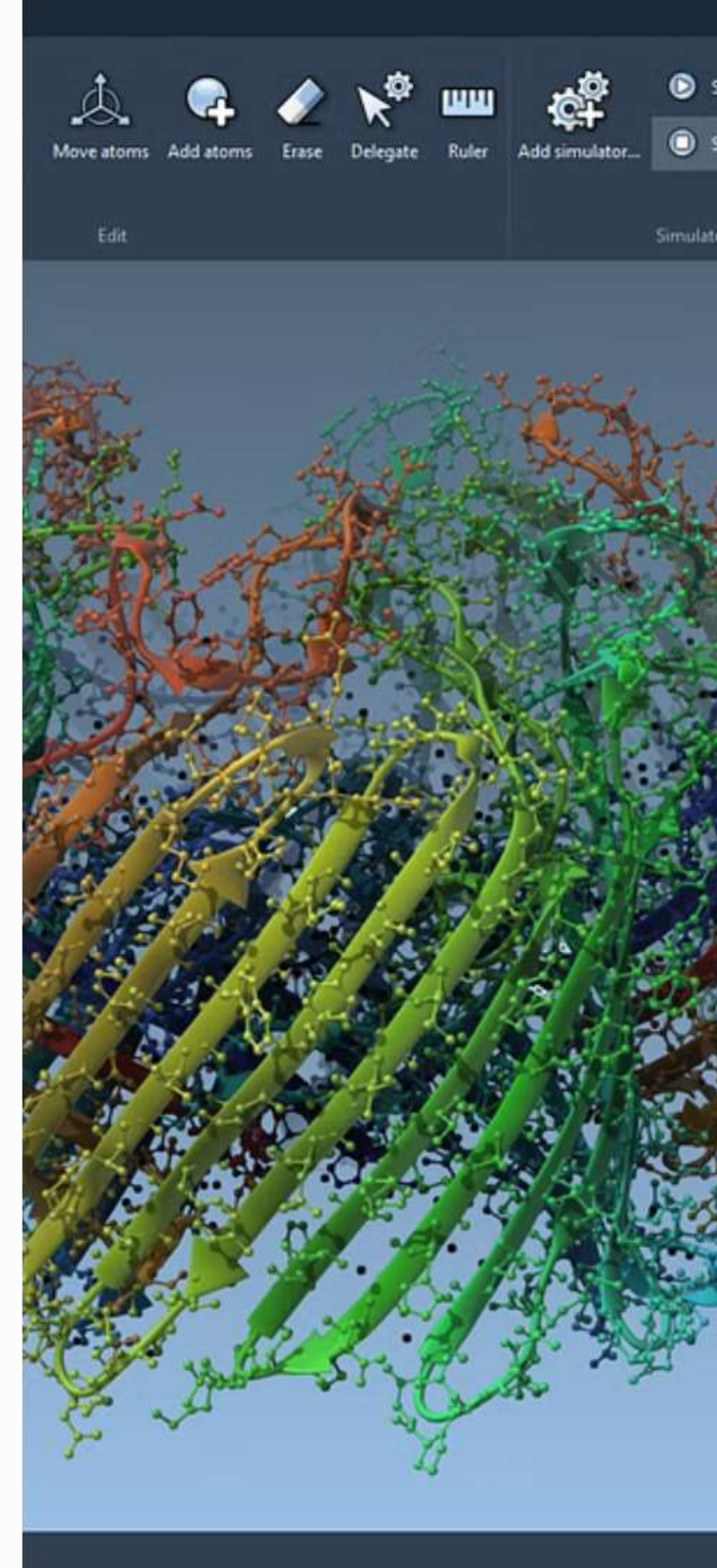
## Analyse de pharmacophore

Identifier les caractéristiques structurales clés pour l'activité biologique et concevoir de nouveaux composés sur cette base.

3

## Criblage virtuel

Cribler virtuellement de grandes chimiothèques pour trouver des molécules candidates prometteuses, avant les tests en laboratoire.

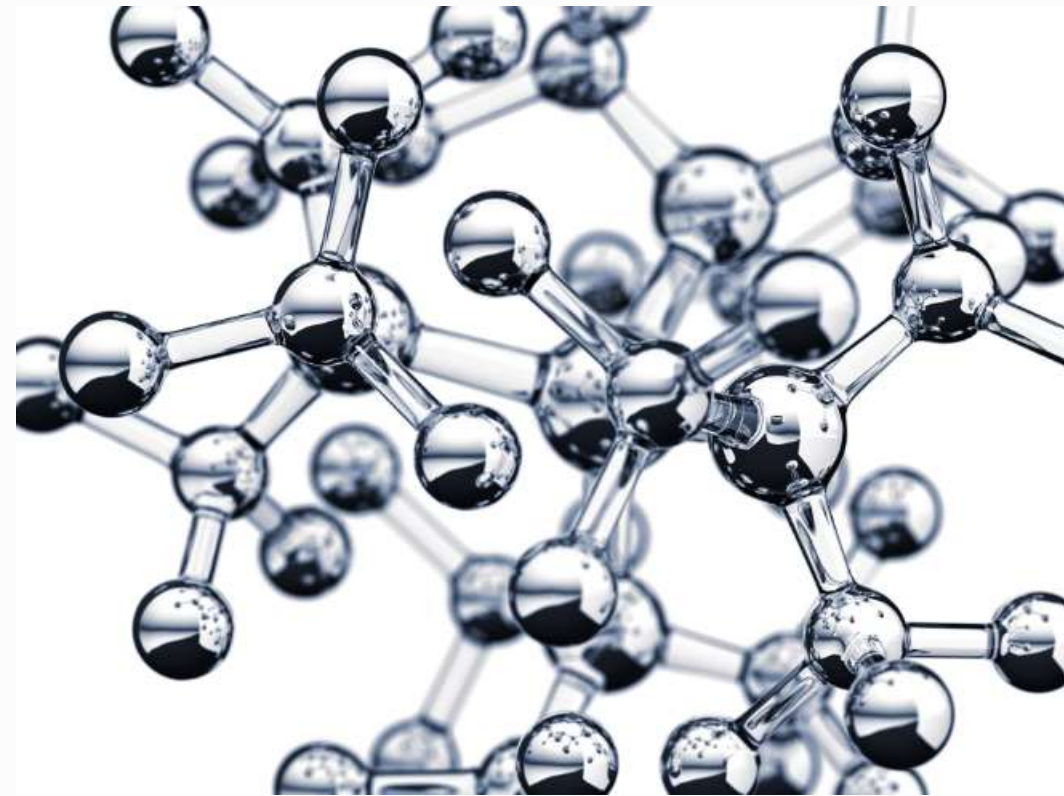




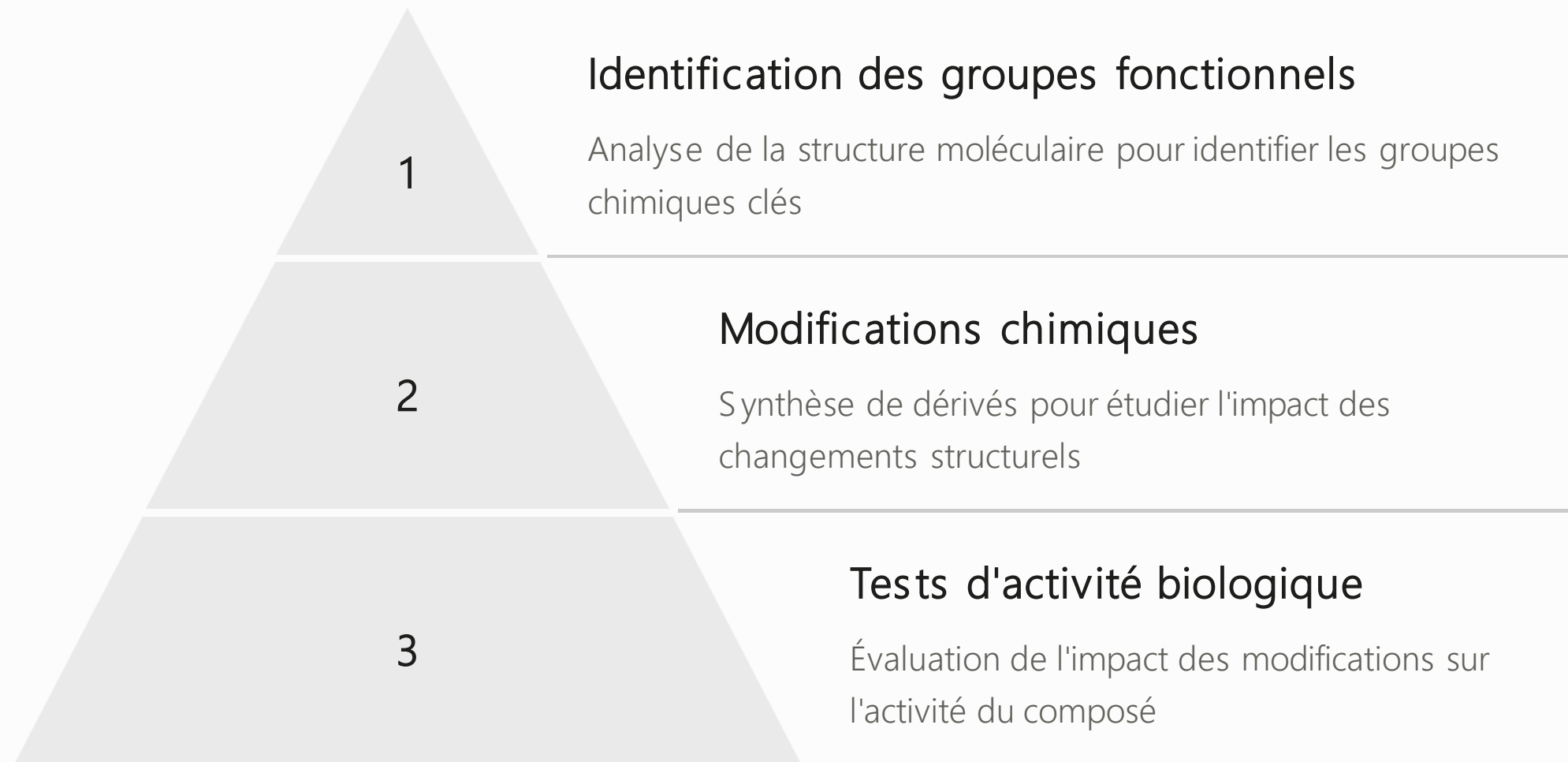
# Optimisation des propriétés physicochimiques

L'optimisation des propriétés physicochimiques est cruciale pour le développement de composés tête de série efficaces. Cela implique d'ajuster des paramètres clés comme la solubilité, la stabilité, la perméabilité et la biodisponibilité.

Des techniques de modélisation moléculaire et de conception de médicaments assistée par ordinateur permettent de prédire et d'améliorer ces propriétés dès les premiers stades du processus de découverte.



# Études de relations structure-activité



Les études de relations structure-activité jouent un rôle essentiel dans l'optimisation des composés tête de série. En analysant en détail la structure chimique, les chercheurs peuvent identifier les groupements fonctionnels clés et synthétiser de nouveaux dérivés. Ils peuvent ensuite tester leur impact sur l'activité biologique, guidant ainsi les efforts de conception médicamenteuse.



# Évaluation de l'activité biologique

L'évaluation de l'activité biologique est une étape cruciale dans la découverte de nouveaux composés tête de série. Elle permet de déterminer l'efficacité du composé sur des cibles biologiques spécifiques, comme des enzymes ou des récepteurs cellulaires.

Des tests in vitro et in vivo sont réalisés pour mesurer l'activité du composé, sa sélectivité, sa puissance et son innocuité. Ces données permettent de sélectionner les candidats les plus prometteurs pour des études plus approfondies.

Études in vitro

Criblage à haut débit, tests d'inhibition enzymatique, études de liaison aux récepteurs

Études in vivo

Tests de toxicité, études pharmacocinétiques, modèles animaux de maladie