**Zeitschrift:** Bulletin de la Société Vaudoise des Sciences Naturelles

**Herausgeber:** Société Vaudoise des Sciences Naturelles

**Band:** 76 (1982-1983)

**Heft:** 364

**Vereinsnachrichten:** Activité de la Société vaudoise des Sciences naturelles : février - juin 1983

**Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

**Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

**Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

**Download PDF:** 14.07.2025

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch**

# Activité de la Société vaudoise des Sciences naturelles

## Février–Juin 1983

**2 février**

*Séance* présidée par M.G. Philippossian
(Auditoire XII, Ecole de Chimie, 17 h. 15)

### Conférence

Dr W.A. Thomas, Roche Products Ltd, Welwyn Garden City, U.K.: *The Application of Computer Graphics to the Design of Novel Therapeutic Agents.*

Pour aider à la découverte de nouveaux médicaments, l'industrie pharmaceutique est constamment à la recherche de méthodes nouvelles qui lui permettent de restreindre les opérations dans la sélection des molécules candidates. L'utilisation des graphiques moléculaires (molecular graphics), par quoi l'on décrit le modelage moléculaire à l'aide d'un ordinateur, est considérée aujourd'hui comme l'un des outils les plus utiles, apparus ces dernières années, pour la chimie médicale.

Les graphiques moléculaires présentent, sur le modelage conventionnel, les avantages suivants: 1. Les modèles de grande dimension de protéines et d'enzymes sont impressionnants pour l'œil, mais ils sont imprécis, lourds et coûteux; la représentation en graphiques est dynamique, exacte et flexible. 2. L'arrimage d'une drogue sur son récepteur peut être simulé par l'ordinateur de façon réelle. L'application des calculs de mécanique moléculaire permet de rejeter les conformations inadéquates et d'optimaliser les caractéristiques des liaisons hydrogènes. 3. Si le récepteur est connu avec exactitude, on peut superposer les structures tridimensionnelles de deux ou plusieurs molécules différentes connues pour se lier au même site actif, afin de repérer les groupes communs les mieux ajustés et de trouver ainsi une nouvelle structure présentant les meilleurs caractères requis pour l'activité. 4. On peut mesurer avec précision les distances interatomiques, les angles de liaison et les angles de torsion; la mise en rotation libre de la molécule autour d'une ou plusieurs de ses liaisons simples permet de dresser la carte du volume occupé ou des sites d'interception avec un groupe fonctionnel liant.

L'exposé était illustré d'exemples d'application des graphiques moléculaires à la conception de nouveaux médicaments, notamment les inhibiteurs de l'élastase, de l'enzyme de conversion de l'angiotensine et de la réductase de l'acide déhydrofolique.

*(Suite en page 380)*