

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

Objekttyp: **AssociationNews**

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

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

Heft 364

PDF erstellt am: **12.07.2024**

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Activité de la Société vaudoise des Sciences naturelles

Février-Juin 1983

2 février

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

Conférence

D^r 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'optimiser 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)