

## Chapitre II : Etude des relations structure-activité (RSA)

## 1. Généralité

Dès l'instant où l'on connaît la structure d'un composé biologiquement actif, le pharmaco-chimiste se met à préparer une série d'analogues structuraux et analyser les résultats de leurs tests biologiques, cette étude va faire appel à l'étude de relation structure activité (RSA). L'objectif d'une telle étude est améliorer les interactions avec le cible et améliorer des paramètres physicochimique du principe actif .

Une telle étude est utilisée pour découvrir quelles parties d'une molécule sont indispensables pour conserver l'activité biologique (le **pharmacophore**).

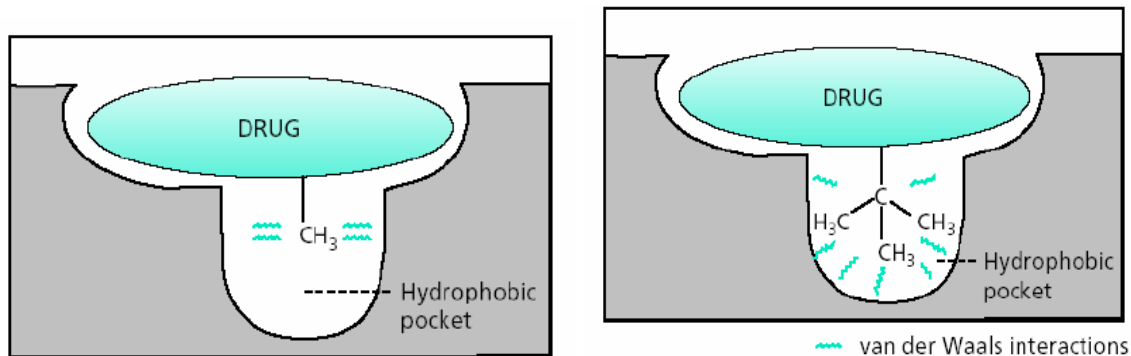
## 2. Identification de la pharmacophore

Est l'ensemble des groupements fonctionnelles importantes qui doivent présentes dans une molécule pour rendre active, comprenant en cela les positions spatiales relatives de chaque de ces molécules. Donc après l'identification des groupements essentiels par étude relation structure activité, il est possible de extraire les parties inutiles de molécules sans diminuer son activité.

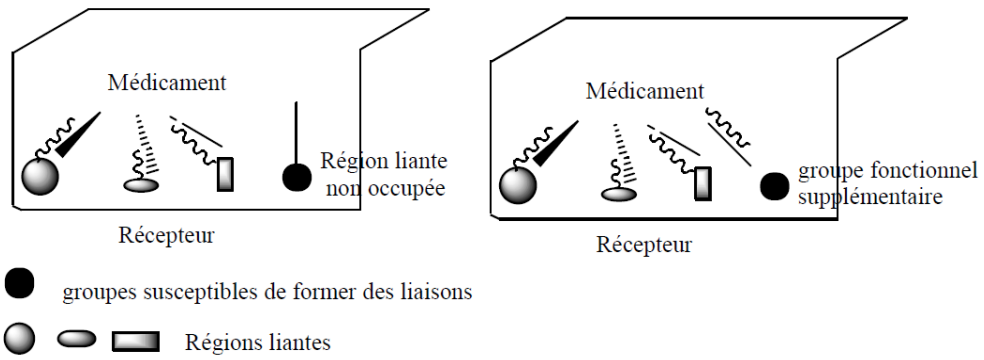
## 3. Amélioration des interactions liantes entre un médicament et sa cible

On peut faire appel à diverses stratégies pour améliorer les interactions entre le médicament et sa cible :

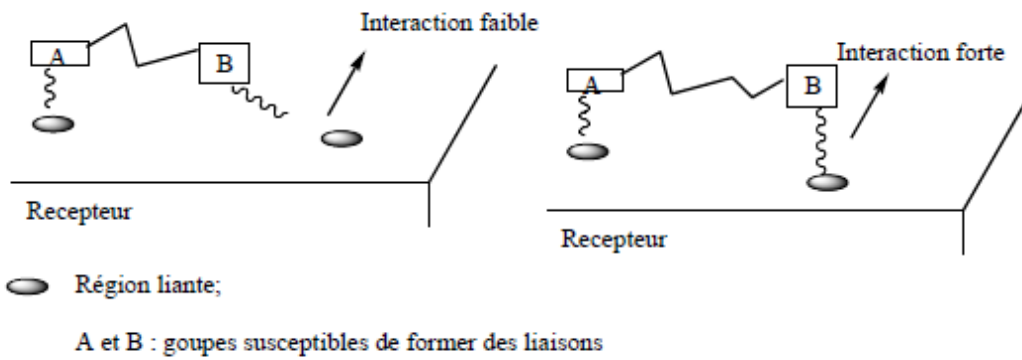
- Placement des substituants divers ;



- Extension de la molécule;



- Allongement et raccourcissement des chaînes;



- Modification de la nature du cycle, accolement des cycles;

