

Présentation de l'équipe Bioinformatique structurale

L'équipe de **bioinformatique structurale, modélisation moléculaire et drug design (M2D2)** est spécialisée dans l'analyse des interactions protéine-protéine ou protéine-petite molécule. Depuis sa création, l'équipe développe et utilise des méthodes de modélisation moléculaire et de criblage *in silico* et les applique à l'identification de molécules à visée thérapeutique pour cibler les interactions protéine-protéine. Elle a, depuis, étendu son champ d'activités.

L'équipe M2D2 a développé de nombreuses collaborations, internes au Cnam avec les équipes ILJ et MSDMA du [Cedric](#) et le laboratoire [Satie](#) et nationales avec notamment des équipes Inserm de [l'institut Imagine et de Paris Descartes](#), de l'université de Nice Sophia Antipolis/CNRS, le LCT de Sorbonne Universités/CNRS, le [Liris de l'Insa/CNRS/Lyon](#) ainsi que l'université de Limoges.

Son savoir-faire repose sur différentes méthodes de modélisation moléculaire des interactions protéine-protéine et protéine-petite molécule, des méthodes de criblage structure ou *ligand-based* et de méthodes de représentation et de visualisation de la structure et des propriétés des protéines.

L'équipe M2D2 a notamment développé :

Deux bases de données exhaustives sur les modulateurs des récepteurs nucléaires ([NR-LiSt/NR-DBIND](#)), la [NR-DBIND](#) est la première base de données incluant une description exhaustive des négatifs réels dans l'évaluation de méthodes

[UDock](#) le premier outil temps réel et usable de prédiction des interactions protéine-protéine (collab. ILJ/[Cedric](#))

les courbes de prédictivité appliquées à l'analyse de données de criblage (collab. MSDMA/[Cedric](#))

[VTX](#), un outil de visualisation moléculaire hautes-performances (collab. Xlim/Univ. Limoges, ILJ/[Cedric](#), LCT/SU)

[Screening explorer](#)

Du point de vue applications thérapeutiques, l'équipe a notamment participé à l'identification :

du premier inhibiteur du TNF α actif par voie orale, cible majeure des maladies immunitaires (Collab. Peptinov)

d'inhibiteurs de la NRP-1, cible majeure dans le cancer (Collab. Inserm/Imagine/Paris Descartes/Univ Nice)

de peptides vaccinaux anti-IL-6, actifs chez le singe (Collab. Peptinov)

Les projets en cours portent principalement sur les axes suivants :

1. Développement, optimisation et évaluation de méthodes de criblage *in silico*.
2. Identification de molécules à visée thérapeutique ciblant les interactions protéine-protéine ([ANR Theranalpha](#)).
3. Développement de méthodes de modélisation des interactions protéine-protéine ([ERC Vidock](#)).
4. Développement de méthodes de visualisation et de simulation interactive de la structure et des propriétés des biomolécules. ([ERC Vidock](#)).