le cnam
GBCM

Génomique, Bioinformatique et Chimie moléculaire

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 moleculaire 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 TNFa 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).

https://gbcm.cnam.fr/equipe-2/presentation-de-l-equipe-bioinformatique-structurale-1051665.kjsp?RH=1549442845660