

Curriculum Vitae

Informations personnelles : Matthieu MONTES

ORCID : 0000-0001-5921-460X
Naissance : 28 Aout 1980, Le Mans, France
Adresse personnelle : 105 rue Haxo, 75020 Paris, France
Téléphone : +33 6.20.39.05.19
E-mail : matthieu.montes_at_cnam.fr
Homepage: <https://gbcm.cnam.fr/le-laboratoire/membres/matthieu-montes-1146208.kjsp?RH=1549445449173>

Poste Actuel

Depuis 2016 **Professeur des Universités** (PR1), 64^e section du CNU, Conservatoire National des Arts et Métiers (CNAM), Paris
2020 **Co-fondateur de Qubit-Pharmaceuticals** (incubée à Paris Biotech Santé)

Expérience professionnelle

2009-2016 Maître de Conférences, 64^e section du CNU, CNAM, Paris
2007-2009 Attaché Temporaire d'Enseignement et Recherches, chaire de bioinformatique, CNAM, Paris
2004-2007 DEA puis Thèse de doctorat, INSERM U648, Université Paris 5
2003 Responsable maintenance matériel et logiciels, Université Paris 7

Titres universitaires

2014 **Habilitation à Diriger des Recherches**, Université Paris Sud
2007 Doctorat en sciences pharmaceutiques, dir : BO Villoutreix, INSERM U648, Université Paris 5, Mention très honorable avec Félicitations, Bourse MNESR
2004 DEA Analyse de génomes et modélisation moléculaire, mention Bien, Université Paris 7
2003 Maîtrise de Biochimie, options Pharmacochimie moléculaire, Bioinformatique, Université Paris 7

Distinctions

2023 **Membre Sénior de l'Institut Universitaire de France** (Chaire Innovation)
2016 **Prix d'encouragement à la recherche** (Société de Chimie Thérapeutique)
Depuis 2013 **Titulaire de la Prime d'Excellence Scientifique** (PES puis PEDR)
2008 **Premier prix de thèse** en chimie pharmaceutique, Paris Descartes

Recherche *57 publications (26 en dernier auteur, h-index 27), 8 brevets, 1 licence de logiciel*

Chemoinformatique

14 publications en dernier auteur

- Evaluation large échelle de méthodes et protocoles de criblage in silico, création de bancs d'essais
- Création de la NRLiSt BDB (<http://nrlist.drugdesign.fr>) et de la NR-Dbind, qui inclue des données négatives (<http://nr-dbind.drugdesign.fr>), banques dédiées aux récepteurs nucléaires
- Introduction des predictiveness curves en criblage (<http://stats.drugdesign.fr>)

Bioinformatique Structurale

ERC, ERC POC, 2 logiciels, 11 publications en dernier auteur

- Création du logiciel de visualisation moléculaire haute performance, VTX (<https://vtx.drugdesign.fr>)
- Co-création de l'outil interactif de docking protéine-protéine UDock (<http://udock.fr>)
- Développement de méthodes de reconnaissance de formes. Organisation d'un concours international de reconnaissance de formes à la conférence Eurographics (<http://www.shrec.net>)

Recherche Biomédicale

8 brevets sur des molécules à visée thérapeutique (Maladies Inflammatoires Chroniques, Cancer), 5 licences à des startups, 1 vaccin en essais cliniques, 1 startup co-créée

- **Co-fondateur de Qubit-Pharmaceuticals**, Spin-off du CNAM, Sorbonne Univ, WashU, UT Austin. Qubit-Pharmaceuticals est notamment lauréate de l'EIC accelerator.
- Design d'un vaccin peptidique contre l'Interleukine-6. Le brevet est licencié à une startup. **Le candidat est en essai clinique de phase 1** (<https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT04447898>)
- Identification d'un **inhibiteur du TNF α actif par voie orale**. Deux brevets sont licenciés à une startup. **Des candidats theranostiques** sont en développement préclinique.
- Identification de petites molécules inhibitrices de cibles impliquées dans les cancers: NRP-1, CXCR1/CXCR2, 20S-Proteasome...

Sélection de contrats de recherche obtenus +3 000 k€, 20M heures calcul

- 2022 : ANR, 170 k€ (sur 700 k€, Projet Gradient)
- 2022 : **ERC Proof of Concept**, 150 k€ (Projet VTX-HPC, PI)
- 2021 : ANR, 150 k€ (sur 700 k€, Projet NeoCombo)
- 2021 : ASTRID-ANR/DGA, 100 k€ (sur 500 k€, Projet D-Stress)
- 2020 : Amazon Web Services, Covid-19, 800 k€, co-PI
- 2020 : H2020 PRACE, 20 000 000 heures de calcul (Projet COVID-HP, co-PI)
- 2017 : ANR PRCE, 25 k€ (sur 700 k€, Projet Theranalpha)
- 2015 : **ERC Starting Grant, 1 500 k€** (Projet VIDOCK, PI)
- 2012 : ANSM, 210 k€ (sur 450 k€, Projet Spoon-Kim, co-PI)

Encadrement doctoral et scientifique

Direction et co-direction de 7 thèses soutenues (H. Guillemain, N. Ben Nasr, N. Lagarde, C. Empereur-mot, M. Réau, L. Sirugue, A Sellami)

Direction et co-direction de 3 thèses en cours (M. Oudahmane, A. Roques, V.Larroque)

Encadrement de 15 stagiaires de Master

Encadrement de 10 ATER et Post-doctorants

Diffusion et Rayonnement

Expertise :

ANR, National Science Center, Pologne (ncn.gov.pl)

Membre du Comité National CE18 de l'ANR

Comités de lecture :

Editeur Frontiers in Bioinformatics, Int J Mol Sci, Future Bioinformatics

Reviewer Nature, Nature comm, WIREs, J Med Chem, CSBJ, Cancers, Bioinformatics, JCIM, JCAMD, J Cheminform, Euro J Med Chem, Frontiers Pharmacol...

Diffusion de la culture scientifique et technique :

- Depuis 2019 **Conférences et participation/modération de tables rondes aux Utopiales** (festival international de science-fiction **100k+ visiteurs**) autour des rapports sciences / science-fiction / société <http://www.utopiales.org>
<https://www.utopiales.org/guest/matthieu-montes/>
- 2020 UDock prototype d'outil interactif de simulation moléculaire, **exposition Prototypes**, musée des arts et métiers. <https://www.arts-et-metiers.net/musee/prototypes>
- 2020 Création de l'atelier grand public « Fabrique ta molécule », musée des arts et métiers. <https://www.arts-et-metiers.net/musee/les-fabricateurs-fabrique-ta-molecule>
- 2019 **Création d'un dispositif de cartographie dynamique pour l'exposition Globes**, le monde à portée de main, musée des arts et métiers <https://www.arts-et-metiers.net/musee/globes-le-monde-portee-de-main>
- Depuis 2016 **Co-organisateur** d'un hackathon de 48h dédié à la création d'œuvres d'art numérique : **Digital Art Jam**, Fête du code créatif, Centre Pompidou, événement annuel en mars. <https://itch.io/jam/digitalartjam>
- 2015 **Conseiller scientifique d'une série de courts métrages documentaires** (10x3'): Jacques a dit, coproduction INA, Universcience (bourse ESTIM), CNAM <http://www.universcience.tv/categorie-jacques-a-dit913.html>
- Depuis 2013 **Direction scientifique du jeu sérieux pour la recherche UDock** <http://udock.fr> primé à l'international (1^{er} prix recherche, 2^e prix du public, iGAM4ER 2013)
- Depuis 2013 **Animation scientifique et membre de jury** lors de manifestations autour des sciences pour des élèves du primaire et secondaire (Fête de la science, Nuit des musées, journée Abbé Grégoire, Ingénieurs en herbe)

Réseaux :

Depuis 2018, Président de la Société Française de Chémoinformatique (SFCl)

Membre de la Société Française de Chémoinformatique (SFCl)

Membre du bureau du Groupe de Graphisme et de Modélisation Moléculaire (GGMM)

Membre du Groupe de Recherche BigDataChim du CNRS.

Membre du Groupe de Recherche Bioinformatique Moléculaire du CNRS (BIM)

Membre du Groupe de Recherche Information, Signal Image Vision de l'INRIA (ISIS)

Membre du Réseau Français en Chimie Théorique (RFCT)

Membre de la Royal Society of Chemistry.

Membre de la société de chimie thérapeutique (SCT)

Organisation de Colloques, journées d'étude

- 2023 Membre du comité d'organisation des 10^e journées de la société Française de Chémoinformatique, Caen, France
- 2021 Membre du comité d'organisation des 9^e journées de la société Française de Chémoinformatique, Lille, France
- 2021 Membre du comité d'organisation de l'atelier criblage du GGMM
- 2019 **Président du comité d'organisation** des 8^e journées de la société Française de Chémoinformatique, Paris, France
- 2018 Membre du comité d'organisation de Chimiométrie 2018, Paris, France
- 2014 Membre du comité d'organisation du colloque From Bioinformatics to Therapeutics, Doha, Qatar

Depuis 2009 Co-organisation du colloque de la chaire de bioinformatique du CNAM, Ermenonville, France

Responsabilités collectives

Depuis 2009 **Responsable de l'équipe Modélisation Moléculaire Drug Design** du laboratoire GBA, puis GBCM (9 personnes dont 1 PR et 1 MCF)

2013-2019 **Directeur Adjoint du laboratoire** GBA, CNAM (18 Personnes dont 2 PR, 3 MCF, 2 IGR, 1 ASI)

Depuis 2022 **Membre élu du conseil d'administration du CNAM**

2014-2016 et depuis 2018 **Membre élu du conseil scientifique du CNAM**

2016-2019 **Membre du conseil de l'école doctorale SMI** (CNAM, ENSAM, Mines Paristech)

Depuis 2017 Membre élu du conseil de l'équipe Pédagogique Nationale (Ex département Chimie Santé Vivant)

2010-2016 Membre élu du conseil de département Ingénierie Mathématique, CNAM

2014-2016 Responsable de l'équipe pédagogique Statistiques – Bioinformatique, CNAM

Membre nommé de commissions internes, CNAM : commission prospective recherche et enseignement 2014-2018 et CNAM2020 ; refonte du règlement intérieur ; commission déontologie recrutements ...

Participation à des commissions de spécialistes pour le recrutement de maîtres de conférences, de professeurs des universités.

Rapporteur de promotions de Professeurs étrangers (tenure tracks) Purdue University (USA)

Examineur en jury de thèse ou HDR (L. Borriello, 2012, Univ Paris Descartes ; E. Goldwaser, 2013, Univ Paris Descartes ; J. Perrier, 2014, CNAM ; F. Aviat, 2019, Sorbonne Univ ; M. Kadukova, 2021, Univ Grenoble ; C. Bouysset, 2021, Univ Nice ; M. Rugar, 2022, Univ Paris Cite, ; N. Leleu, 2022, Univ Lille)

Rapporteur en jury d'HDR (K. Audouze, 2016, Univ Paris Diderot ; G. Moroy, 2019, Univ Paris Diderot ; P. Poulain, 2022, Univ Paris Cite)

Rapporteur en jury de thèse (I. Rasolohery, 2016, Univ Paris Diderot ; JM Gally, 2017, Univ Orleans ; T. Freyd, 2018, Arctic University of Norway, Norvege ; A. Lin, 2019, Univ Strasbourg ; J. Sawmynaden, 2020, Sorbonne Univ ; VK Tran-Nguyen, 2020, Univ Strasbourg ; C. Depenveiller, 2022, Univ Reims ; B. Dudas, 2022, Univ Paris Cite)

Activités d'enseignement

Création et co-responsabilité nationale du diplôme d'ingénieur en bioinformatique du CNAM (CYC74).

Co-cr ation de la plateforme JupyterHub-GPU de Hesam Universite (obtention de financements regionaux et locaux pour un total de 70 k  en 2021-2022)

Cr ation d’un atelier/cours retro engineering et culture scientifique au mus e des arts et m tiers

Cr ation d’un cours/TP d’optimisation/machine learning autour de l’ quilibrage d’un jeu de Cartes   Collectionner, M1 Programmation, CNAM-ENJMIN (3 ECTS)

Cr ation et responsabilit  d’une unit  d’enseignement (UE) niveau Master BNF201, “drug design, mod lisation mol culaire” accessible en pr sentiel au CNAM hors temps de travail (6 ECTS, HTT, cours du soir)

Participation   diff rentes UEs niveau licence et master en biologie structurale, chimie th rapeutique, bioinformatique g n rale, initiation   la mod lisation mol culaire et communication pour l’ing nieur en HTT et en FOAD au CNAM.

Co-cr ation et participation   des formations continues dans l’industrie cosm tique (CERIES) et pharmaceutique (Sanofi-Aventis, LFB, Institut de recherches Servier)

Tutorat en licence professionnelle de pharmacovigilance et en licence professionnelle de bioinformatique.

Rapporteur ou examinateur en jurys de m moire d’ing nieurs en g nie biologique, bioinformatique et chimie pharmaceutique.

Mentor du programme de mentorat femmes et sciences de l’universit  Paris Saclay

Liste de publications

(étudiants directement co-encadrés, *contributions équivalentes)

1 Articles dans des revues ou conférences internationales à comité de lecture

P57. Larroque V, Maria M, Merillou S, **Montes M**. Automatic molecular tour creation: a study. Eurographics, 2023, in press.

P56. Sellami A, Réau M, **Montes M**, Lagarde M. Review of in silico studies dedicated to the nuclear receptor family: therapeutic prospects and toxicological concerns. Frontiers in Endocrinol, 2022, in press

P.55. El Khoury L, Jing Z, Cuzzolin A, Deplano A, Loco D, Sattarov B, Hedin F, Wendeborn S, Ho C, El Ahdab D, Jaffrelot Inizan T, Sturleze M, Sosic A, Volpiana M, Lugato A, Barone M, Gatto B, Macchia ML, Bellanda M, Battistutta R, Salata C, Kondratov I, Iminov R, Khairulin A, Mykhalonok Y, Pochevko A, Chashka-Ratushmyi V, Kos I, Moro S, **Montes M**, Ren P, Ponder JW, Lagardere L, Piquemal JP, Sabbadin D. Computationally driven discovery of SARS-CoV-2 Mpro inhibitors: from design to experimental validation. Chem Sci, 2022, in press

P54. Langenfeld, F, Aderinwale T, Christoffer C, Shin WH, Terashi G, Wang X, Kihara D, Benhabiles H, Hammoudi K, Cabani A, Windal F, Melkemi M, Otu E, Zwiggelaar R, Hunter D, Liu Y, Sirugue L, Nguyen HN, Nguyen TDH, Nguyen-Truong VT, Le D, Nguyen HD, Tran MT, **Montes M**. Surface-based protein domains retrieval methods from a SHREC2021 challenge. J Mol Graph Model, 2022, 111, 108103

P53. Langenfeld, F, Aderinwale T, Christoffer C, Shin WH, Terashi G, Wang X, Kihara D, Benhabiles H, Hammoudi K, Cabani A, Windal F, Melkemi M, Otu E, Zwiggelaar R, Hunter D, Liu Y, Sirugue L, Nguyen HN, Nguyen TDH, Nguyen-Truong VT, Le D, Nguyen HD, Tran MT, **Montes M**. SHREC 2021: Surface-based protein domains retrieval. Eurographics Workshop on 3D Object Retrieval 2021, 19-26

P52. Machat M, Langenfeld F, Craciun D, Sirugue L, Labib T, Lagarde N, Maria M, **Montes M**. *Comparative Evaluation of Shape Retrieval Methods on Macromolecular Surfaces: An Application of Computer Vision Methods in Structural Bioinformatics*. Bioinformatics, 2021, 1-8

P51. Sellami A, Lagarde N, **Montes M**. Predicting potential EDCs binding to ER α using a pipeline combining SB and LB in silico methods, Int J Mol Sci, 2021;22(6):2846.

P50. Jaffrelot Inizan T, Celerse F, Adjoua O, El Ahdab D, Jolly LH, Liu C, Ren P, **Montes M**, Lagarde N, Lagardere L, Monmarche P, Piquemal JP. High-Resolution Mining of SARS-CoV-2 Main Protease Conformational Space: Supercomputer-Driven Unsupervised Adaptive Sampling. Chem Sci, 2021,12, 4889-4907

P49. Dumond A, Brachet E, Durivault J, Vial V, Puszko A, Lepelletier Y, Montemagno C, Pagnuzzi-Boncompagni M, Hermine O, Garbay C, Lagarde N, **Montes M**, Demange L, Grepin R, Pages G. Neuropilin 1 and Neuropilin 2 gene invalidation or pharmacological inhibition reveals their relevance for the treatment of metastatic renal cell carcinoma. J Exp Clin Cancer Res, 2021;40(1):33

P48. Langenfeld F, Peng Y, Lai YK, Rosin PL, Aderinwale T, Terashi G, Christoffer C, Kihara D, Benhabiles H, Hammoudi K, Cabani A, Windal F, Melkemi M, Giachetti A, Mylonas S, Axenopoulos A, Daras P, Otu E, Zwiggelaar R, Hunter D, Liu H, **Montes M**. SHREC2020 track: Multi-domain protein shape retrieval challenge. Computer & Graphics, 2020, 91:189-198

P47. Bouchara T, **Montes M**. *Immersive sonification of protein surfaces*. 2020 IEEE Conference on Virtual Reality and 3D User Interfaces Abstracts and Workshops (VRW), 2020, 380-383

P46. Réau M, Lagarde N, Zagury JF, **Montes M**. *Hits Discovery on the Androgen Receptor: In Silico Approaches to Identify Agonist Compounds*. Cells. 2019 Nov 13;8(11) pii: E1431

- P45. Dufies M, Grytsai O, Ronco C, Camara O, Ambrosetti D, Hagege A, Parola J, Mateo L, Ayrault M, Giuliano S, Grépin R, Lagarde N, **Montes M**, Auberger P, Demange L, Benhida R, Pagès G. *New CXCR1/CXCR2 inhibitors represent an effective treatment for kidney or head and neck cancers sensitive or refractory to reference treatments*. *Theranostics*, 2019, 9 (18):5332-5346
- P44. Langenfeld F, Axenopoulos A, Benhabiles H, Daras P, Giachetti A, Han X, Hammoudi K, Kihara D, Lai T, Liu H, Melkemi M, Mylonas S, Terashi G, Wang Y, Windal F, **Montes M**. *SHREC'19 Protein Shape Retrieval Contest*. *Eurographics Workshop on 3D Objects Retrieval*, 2019; 25-31
- P43. Réau M, Lagarde N, Zagury JF, **Montes M**. *Nuclear Receptors DataBase Including Negative Data (NR-DBIND): A database dedicated to nuclear receptors binding data including negative data and pharmacological profile*. *J Med Chem*, 2019, 62(6):2894-2904
- P42. Langenfeld F, Axenopoulos A, Chtziotis A, Craciun D, Daras P, Du B, Giachetti A, Lai YK, Li H, Li Y, Masoumi M, Peng Y, Rosin PL, Sirugue J, Sun L, Thermos S, Toews M, Wei Y, Wu Y, Zhai Y, Zhao T, Zhen Y, **Montes M**. *SHREC'18 – Protein Shape Retrieval*. *Eurographics Workshop on 3D Objects Retrieval*, 2018; 53-61
- P41. Rayar A, Lagarde N, Martin F, Blanchard F, Liagre B, Ferroud C, Zagury JF, **Montes M**, Sylla-Iyarreta Veitia M. *New selective cyclooxygenase-2 inhibitors from cyclocoumarol: Synthesis, characterization, biological evaluation and molecular modeling*. *Eur J Med Chem* 2018, 146:577-587
- P40. Réau M, Langenfeld F, Zagury JF, Lagarde N, **Montes M**. *Decoys Selection in Benchmarking Databases*. *Frontiers in Pharmacol*, 2018; 9,11
- P39. Liu WQ, Lepelletier Y, **Montes M**, Borriello L, Jarray R, Grepin R, Leforban B, Loukaci A, Benhida R, Hermine O, Dufour S, Pages G, Garbay C, Raynaud F, Hadj-Slimane R, Demange L. *NRPA-308, a new neuropilin-1 antagonist, exerts in vitro anti-angiogenic and anti-proliferative effects and in vivo anti-cancer effects in a mouse xenograft model*. *Cancer Lett*, 2018; 414, 88-98
- P38. Réau M, Langenfeld F, Zagury JF, **Montes M**. *Predicting the affinity of Farnesoid X Receptor ligands through a hierarchical ranking protocol: a D3R Grand Challenge 2 case study*. *J Comput Aided Mol Des*, 2017, 1-8
- P37. Rayar A, Lagarde N, Ferroud C, Zagury JF, **Montes M**, Sylla-Iyarreta Veitia M. *Update on COX-2 selective inhibitors: chemical classification, side effects and their use in cancers and neuronal diseases*. *Curr Top Med Chem*, 2017; 17(26), 2935-2956
- P36. Craciun D, Sirugue J, **Montes M**, *Global-to-Local Protein Shape Similarity System driven by Digital Elevation Models*, *IEEE Biosmart*, 2017
- P35. Lagarde N, Delahaye S, Jérémie A, Ben Nasr N, Guillemain H, Empereur-mot C, Laville V, Labib T, Réau M, Langenfeld F, Zagury JF, **Montes M**. *Discriminating agonist from antagonist ligands of the nuclear receptors using different chemoinformatics approaches*. *Mol Inf*, 2017; 36 (10)
- P34. Mouhsine H, Guillemain H, Moreau G, Fourati N, Zerrouki C, Baron B, Desallais L, Gizzi P, Ben Nasr N, Perrier J, Ratsimandresy R, Spadoni JL, Do H, England P, **Montes M***, Zagury JF*. *Identification of an in vivo orally active dual-binding protein-protein interaction inhibitor targeting TNF α through combined in silico/in vitro/in vivo screening*. *Sci Rep*, 2017; 7(1), 3424
- P33. Craciun D, Levieux G, **Montes M**. *Shape Similarity System driven by Digital Elevation Models for Non-Rigid Shape Retrieval*. *Eurographics Workshop on 3D Object Retrieval*, 2017.
- P32. Song N, Craciun D, Christoffer CW, Han X, Kihara D, Levieux G, **Montes M**, Qin H, Sahu P, Terashi T, Liu H. *SHREC 2017 – Classification of Protein Shapes*. *Eurographics Workshop on 3D Object Retrieval*, 2017

- P31. Empereur-mot C, Zagury JF, **Montes M**. *Screening Explorer – An interactive tool for the analysis of screening results*. J Chem Inf Model. 2016; 56(12): 2281-2286
- P30. Moreau G, Fourati N, Zerrouki C, Mouhsine H, **Montes M**, Port M, Sylla-Iyarreta M, Zagury JF, Yaakoubi N. *Surface acoustic wave biosensors for the quantification of the TNFa/SPD-304 interaction*. 30th Eurosensors Conference, Procedia Engineering 2016; 168:432-435
- P29. Lagarde N, Delahaye S, Zagury JF, **Montes M**. *Discriminating agonist and antagonist ligands of the nuclear receptors using 3D-pharmacophores*. J. Cheminform 2016, 8(1):43
- P28. Desallais L, Bouchez C, Mouhsine H, Moreau G, Ratsimandresy R, **Montes M**, Do H, Quintin-Colonna F, Zagury JF. *Immunization against an IL-6 peptide induces anti-L-6 antibodies and modulates the Delayed-Type Hypersensitivity reaction in cynomolgus monkeys*. Scientific Reports. 2016, 6:19549
- P27. Empereur-Mot C, Guillemain H, Latouche A, Zagury JF, Viallon V, **Montes M**. *Predictiveness curves in virtual screening*. J Cheminform 2015, 7:52
- P26. Spadoni JL, Rucart P, Le Clerc S, van Manen D, Coulonges C, Ulveling D, Laville V, Labib T, Taing L, Delaneau, **Montes M**, Schuitemaker H, Noirel J, Zagury JF. *Identification of Genes Whose Expression Profile Is Associated with Non-Progression towards AIDS Using eQTLs..* Plos One 2015; 10(9):e0136989.
- P25. Lagarde N, Zagury JF, **Montes M**. *Benchmarking datasets for the evaluation of virtual ligand screening methods: review and perspectives*. J Chem Inf Model. 2015, 55 (7): 1297–1307
- P24. Levieux, G.; **Montes, M.**, "Towards real-time interactive visualization modes of molecular surfaces: examples with Udock," Virtual and Augmented Reality for Molecular Science (VARMS@IEEEVR), 2015:19-23
- P23. Lagarde N, Zagury JF, **Montes M**. *Importance of the pharmacological profile of the bound-ligand in enrichment: Towards the use of decoy ligands*. J Chem Inf Model. 2014, 54 (10): 2915–2944
- P22. Liu WQ, Meggale V, Borriello L, Leforban B, **Montes M**, Goldwaser E, Gresh N, Piquemal JP, Hadj-Slimane R, Hermine O, Garbay C, Raynaud F, Lepelletier Y, Demange L. *Synthesis and structure-activity relationship of non-peptidic antagonists of Neuropilin-1 receptor*. Bioorg Med Chem Lett 2014, 24, 4254-4259
- P21. Le Clerc S, Delaneau O, Coulonges C, Spadoni JL, Labib T, Laville V, Ulveling D, Noirel J, **Montes M**, Schächter F, Caillat-Zucman S, Zagury JF. *Evidence for a Role of Mica Variants in non Progression and Elite Control in AIDS After Imputation*. J Infect Dis 2014; 210(12):1946-1950
- P20. Desallais L, Avouac J, Fréchet M, Elhai M, Ratsimandresy R, **Montes M**, Mouhsine H, Do H, Zagury JF, Allanore Y. *Targeting IL-6 by both passive or active immunization strategies prevents bleomycin-induced skin fibrosis*. Arthritis Research & Therapy. 2014; 16:R157.
- P19. Borriello L, **Montes M**, Lepelletier Y, Leforban B, Liu WQ, Demange L, Delhomme B, Pavoni S, Jarray R, Boucher JL, Dufour S, Hermine O, Garbay C, Hadj-Slimane R, Raynaud F. *Structure-Based Discovery of a Small non-peptidic Neuropilins antagonist exerting in vitro and in vivo Anti-Tumor Activity on breast cancer model*. Cancer Lett. 2014; 349(2):120-127
- P18. Lagarde N, Ben Nasr N, Jeremie A, Guillemain H, Laville V, Labib T, Zagury JF, **Montes M**. *NRLiSt BDB, the manually curated nuclear receptors Ligands and Structures benchmarking database*. J Med Chem 2014, Mar 17; 57(7):3117-3125
- P17. Levieux G, Tiger G, Natkin S, Zagury JF, **Montes M**. *FD169: UDock, the protein docking entertainment system*. Faraday Discuss. 2014, 169 (1): 425-441

P16. Maréchal X, Genin E, Qin L, Sperandio O, **Montes M**, Basse N, Richy N, Miteva MA, Reboud-Ravaux M, Vidal J, Villoutreix BO. *1,2,4-Oxadiazoles Identified by Virtual Screening and their Non-covalent inhibition of the Human 20S Proteasome*. *Curr Med Chem* 2013; 20(18):2351-2362

P15. Ben Nasr N*, Guillemain H*, Lagarde N*, Zagury JF, **Montes M**. *Multiple structures for Virtual Ligand Screening: defining binding site properties-based criteria to optimize the selection of the query*. *J Chem Inf Model*. 2013 Feb 25; 53(2):293-311

P14. Limou S, Delaneau O, van Manen D, An P, Sezgin E, Le Clerc S, Coulonges C, Troyer JL, Veldink JH, van den Berg LH, Spadoni JL, Taing L, Labib T, **Montes M**, Delfraissy JF, Schachter F, O'Brien SJ, Buchbinder S, van Natta ML, Jabs DA, Froguel P, Schuitemaker H, Winkler CA, Zagury JF. *Multicohort genomewide association study reveals a new signal of protection against HIV-1 acquisition*. *J Infect Dis*. 2012 Apr 1; 205(7):1155-62.

P13. Le Clerc S, Coulonges C, Delaneau O, Van Manen D, Herbeck JT, Limou S, An P, Martinson JJ, Spadoni JL, Therwath A, Veldink JH, van den Berg LH, Taing L, Labib T, Mellak S, **Montes M**, Delfraissy JF, Schächter F, Winkler C, Froguel P, Mullins JI, Schuitemaker H, Zagury JF. *Screening Low Frequency SNPS From Genome Wide Association Study Reveals A New Risk Allele for Progression to Aids*. *J Acquir Immune Defic Syndr*. 2011 Mar 1; 56(3):279-284.

P12. Giganti D*, Guillemain H*, Spadoni JL, Nilges M, Zagury JF, **Montes M**. *Comparative evaluation of 3D-virtual screening methods: impact of molecular alignment on enrichment*. *J Chem Inf Model* 2010, Jun 28; 50(6):992-1004.

P11. Limou S, Coulonges C, Herbeck J, Van Manen D, Ping An, Le Clerc S, Delaneau O, Diop G, Taing L, **Montes M**, Spadoni JL, Labib T, Therwath A, Rouzioux C, Delfraissy JF, Lelièvre JD, Lévy Y, Herberg S, Dina C, Phair J, Donfield S, Goedert J, Schächter FS, Gut I, Froguel P, Mullins J, Winkler C, Zagury JF. *Multi-cohort genetic association study reveals CXCR6 as a new chemokine receptor involved in AIDS long-term non-progression*. *J Infect Dis* 2010, Sep 15; 202(6):908-15

P10. Basse N, **Montes M**, Marechal X, Qin L, Bouvier-Durand M, Genin E, Vidal J, Villoutreix BO, Reboud-Ravaux M. *Novel Organic Proteasome Inhibitors Identified by Virtual and in Vitro Screening*. *J Med Chem* 2010, Jan 14; 53(1):509-13

P9. Le Clerc S, Limou S, Coulonges C, Carpentier W, Dina C, Taing L, Delaneau O, Labib T, Sladek R, ANRS Genomic Group, Deveau C, Guillemain H, Ratsimandresy R, **Montes M**, Spadoni JL, Lelièvre JD, Lévy Y, Therwath A, Schächter F, Matsuda F, Gut I, Froguel P, Delfraissy JF, Herberg S, Zagury JF. *Genome-Wide Association Study Identifies New Susceptibility Alleles for AIDS Progression (ANRS Genomewide Association Study 03)*, *J Infect Dis* 2009, Oct 15; 200(8):1194-201

P8. Limou S, Le Clerc S, Coulonges C, Carpentier W, Dina C, Delaneau O, Labib T, Taing L, Sladek R; ANRS Genomic Group, Deveau C, Ratsimandresy R, **Montes M**, Spadoni JL, Lelièvre JD, Lévy Y, Therwath A, Schächter F, Matsuda F, Gut I, Froguel P, Delfraissy JF, Herberg S, Zagury JF. *Genomewide Association Study of an AIDS-Nonprogression Cohort Emphasizes the Role Played by HLA Genes (ANRS Genomewide Association Study 02)*, *J Infect Dis* 2009, Feb 1; 199(3):419-26

P7. Hennebert O, **Montes M**, Favre-Reguillon A, Chermette H, Ferroud C, Morfin R. *Steroid substrate-induced epimerase mechanism in the active site of the human 11 β Hydroxysteroid dehydrogenase type 1*, *J Steroid Biochem Mol Biol* 2009, Mar; 114(1-2):57-63

P6. **Montes M***, Braud E*, Miteva M, Goddard ML, Mondesert O, Kolb S, Brun MP, Ducommun B, Garbay C, Villoutreix BO. *Receptor-based virtual ligand screening for the identification of novel CDC25 phosphatase inhibitors*, *J Chem Inf Model* 2008, Jan; 48(1):157-65

P5. Villoutreix BO, Renault N, Lagorce D, Sperandio O, **Montes M**, Miteva MA. *Free Resources to assist*

Structure-Based virtual ligand screening experiments, Curr Prot Pept Sci 2007, Aug; 8(4):381-411

P4. **Montes M**, Miteva MA, Villoutreix BO. *Structure-Based virtual ligand screening with LigandFit, pose prediction and enrichment of compound collections*, Proteins 2007, 68:712-25

P3. Miteva MA, Violas S, **Montes M**, Gomez D, Tuffery P, Villoutreix BO. *FAF-Drugs : Free ADME-Tox Filtering of compound collections*. Nucleic Acids Res 2006, 34:738-44

P2. Miteva MA*, Lee WH*, **Montes MO**, Villoutreix BO. *Fast Structure-Based virtual ligand screening combining FRED, DOCK and Surflex*. J Med Chem 2005, 48:6012-22

P1. Brun MP, Braud E, Angotti D, Mondesert O, Quaranta M, **Montes M**, Miteva MA, Gresh N, Ducommun B, Garbay C. *Design, synthesis and biological evaluation of novel naphthoquinone derivatives with CDC25 phosphatase inhibitory activity*. Bioorg Med Chem 2005, Aug 15; 13(16):4871-79

2 Chapitres d'ouvrages collectifs

C4. Sellami A, Reau M, Langenfeld F, Lagarde N, **Montes M**. *Virtual Libraries for Docking Methods: Guidelines for the Selection and the Preparation*, Molecular Docking for Computer-Aided Drug Design, Elsevier, in press

C3. **Montes M**, Zagury JF. *La bioinformatique*, Panorama de la virologie (2013), Belin Sup Sciences, ISBN 978-2-7011-5884-6

C2. **Montes M**. *Designing Protein-Protein Interaction Inhibitors*, Computational Protein-Protein Interactions (2009), Taylor&Francis, CRC Press, ISBN:978-1-4200-7005-7

C1. Autin L*, **Montes M***, Miteva MA, Villoutreix BO. *Computer tools to study intermolecular interactions*, Recent Research Developments in Protein Engineering, Vol2 (2007) Part I, ISBN:978-81-308-0208-4

3 Brevets

B8. Benchekroun M, Cabrera D, Mascret A, **Montes M**, Mouhsine H, Port M, Ricco C, Sylla M, Zagury JF. Theranostic Inhibitors of TNF alpha. EP20306371.4

B7. Rignault R, **Montes M**, Raynaud F, Demange L, Hermine O, Lepelletier Y. A Neuropilin antagonist in combination with a P38-alpha kinase inhibitor for the treatment of cancer. EP19305719.7

B6. Belaid-Choukair Z, **Montes M**, Hermine O. Agents capable of inhibiting the binding between leptin and VEGF165. EP15306490

B5. Belaid-Choukair Z, **Montes M**, Hermine O. Agents capable of inhibiting the binding between leptin and neuropilin-1. EP15306471

B4. **Montes M**, Desallais L, Zagury JF. Traitement de pathologies liées à un effet excessif de l'IL-6 par immunisation active WO2013021284A2

B3. **Montes M**, Mouhsine H, Guillemain H, Zagury JF. Traitement d'une pathologie liée à un effet excessif du TNF par un composé de benzene-sulfonamide, FR1055867 ; WO2012017166

B2. **Montes M**, Basse N, Marechal X, Vidal J, Reboud-Ravaux M, Villoutreix BO. Piperazine derivatives as proteasome modulators, EP08305378.5, WO2010001365A1

B1. **Montes M**, Basse N, Marechal X, Vidal J, Reboud-Ravaux M, Villoutreix BO. Nitrogen heterocycle derivatives as proteasome modulators, EP08305377.7, WO2010001366A1

4. Banques et logiciels

BL1. UDock, voir publication P17. <http://udock.fr>

BL2. NRLiSt BDB, voir publication P18. <http://nrlist.drugdesign.fr>

BL3. Screening Explorer, voir publication P31. <http://stats.drugdesign.fr>

BL4. NR-DBIND, voir publication P43. <http://nr-dbind.drugdesign.fr>

BL5. VTX. <http://vtx.drugdesign.fr> Twitter @VTX_mol