

"Technologies *in silico* 3D intégrées pour faciliter la prise de décision en médecine moléculaire et pour la recherche de candidats médicaments"

Dr. Bruno Villoutreix, Inserm U973, Paris

Lundi 02 juillet - 10h

Amphi Buttiaux – Institut Pasteur de Lille

Les approches bioinformatiques et chémoinformatiques contribuent à la découverte de nouvelles cibles thérapeutiques, de sondes pharmacologiques, de candidats médicaments et aident à l'analyse de certains mécanismes physiopathologiques. Un vaste répertoire de méthodes a été développé ces 10 dernières années et je vais notamment aborder dans ce séminaire l'analyse en 3D de mutations ponctuelles et des poches de fixation de ligands, le criblage virtuel de collections « généralistes » ou spécialisées pour la modulation des interactions protéine-protéine / protéine-membrane ou pour le repositionnement de médicaments. Dans nos travaux, l'intégration des approches *in silico* et expérimentales a toujours été bénéfique en stimulant l'innovation et en favorisant l'émergence d'idées tout en contribuant à la réduction des coûts.

