

4^{èmes} journées de la chimiothèque nationale chembiofrance

Livret

**Nice - Château de Valrose
1er et 2 juin 2023**

jcbf2023.sciencesconf.org



ChemBioFrance



Présentation des Journées

ChemBioFrance

ChemBioFrance est une Infrastructure nationale de recherche labellisée en 2018 par le Ministère de l'Enseignement supérieur, de la recherche et de l'innovation. Sa mission est de fournir une offre intégrée de services pour la découverte et l'utilisation de petites molécules pour "comprendre et soigner le vivant" (sondes biologiques et candidats médicaments).

ChemBioFrance est une infrastructure distribuée sur tout le territoire national se compose des piliers suivants :

La Chimiothèque Nationale (CN), qui maintient une collection de composés et d'extraits naturels et qui les distribue aux utilisateurs. Elle est le fruit de la collaboration de 48 équipes, rattachées à 42 Organismes de recherche, Ecoles et Universités qui fournissent les molécules de la chimiothèque. Le laboratoire ICN de Nice est un des contributeurs de la Chimiothèque Nationale ;

Une plateforme de chémoinformatique distribuée sur 8 sites à laquelle contribue le laboratoire IPMC de Sophia Antipolis ;

Un réseau de 9 plateformes de criblage dont fait partie la plateforme MaSC (Marseille Screening Center) ;

Un réseau de trois plateformes d'ADME toxicologie.

Le siège de l'infrastructure est situé à Montpellier, de même que l'unité CNRS en charge de sa gestion.

Les Journées annuelles de la Chimiothèque Nationale - ChemBioFrance

Les Journées annuelles de la Chimiothèque Nationale - ChemBioFrance revêtent une grande importance pour cette communauté et sont l'occasion pour les 62 laboratoires membres de l'infrastructure de faire le bilan des activités menées, d'échanger leurs expériences sur les collaborations en cours et de définir les orientations et les objectifs pour l'année à venir.

Ces journées permettent également l'organisation d'un mini-symposium autour de thèmes à l'interface de la chimie et de la biologie. Elles sont articulées autour de 3 conférences plénières par des chercheurs renommés et d'une session de communications flash (3 min) et posters réalisés par des étudiants et jeunes chercheurs.

Ces journées rassemblent une centaine de personnes, parmi lesquelles des représentants des équipes partenaires (1 à 2 personnes par unité) et des acteurs de la recherche locale (30 personnes).

Précédentes éditions :

Les Journées de la Chimiothèque Nationale sont organisées chaque année dans une ville différente par une des équipes associées. Les dernières éditions se sont déroulées à Strasbourg (2019), à Montpellier (2021) après une interruption en 2020 due à la situation sanitaire puis à Lyon (2022).

Mot des organisateurs

La ville de Nice est au coeur d'un territoire exceptionnellement beau et contrasté, entre mer et montagne. Sur la Côte d'Azur, les sublimes plages et la mer transparente forment un parfait équilibre avec les petits villages perchés de l'arrière-pays et les vertes vallées montagneuses. Au printemps, alors que l'hiver quitte les montagnes et que l'été gagne le littoral, il n'est pas fantaisiste de débiter sa journée skis aux pieds pour l'achever sur une plage. Tout un art de vivre.... En Côte d'Azur, le CNRS compte 28 structures de recherche et de service réparties sur les neuf des dix instituts du CNRS parmi lesquels on trouve les sciences du vivant notamment dans le domaine de la santé, représentés par trois grands instituts de renommée mondiale (IPMC, iBV et IRCAN), ainsi que les sciences chimiques au sein d'un institut de chimie à Nice (ICN), par des thématiques originales reconnues internationalement (arômes, parfums, synthèse, molécules bioactives). Le CNRS tout comme l'Inserm assurent une présence conséquente en lien étroit avec ses partenaires académiques de l'Université Côte d'Azur (UCA), lauréate du label Initiative d'Excellence Idex (UCAJEDI). La Côte d'Azur offre également un écosystème industriel et d'innovation qui comprend des entreprises de classe mondiale, des PME, des start-ups et des pôles de compétitivité. Sophia Antipolis, située dans parc de 2400 hectares, est la première technopole d'Europe rassemblant 2500 entreprises, 40 000 salariés et 4500 chercheurs. Dans le domaine de la santé et des biotechnologies, 170 établissements azuréens sont recensés dont près d'un tiers appartient à l'industrie biopharmaceutique (4000 emplois) et un autre tiers spécialisé dans la gestion et la logistique des essais cliniques et des services à l'industrie (CRO).

Les 4èmes Journées de la Chimiothèque Nationale-ChemBioFrance auront lieu sur le site du château de Valrose à Nice. Classé Monument Historique depuis 1991, Valrose était le nom d'une des plus belles propriétés de la Riviera. C'est aujourd'hui le nom d'un Campus universitaire parmi les mieux situés de France, siège d'Université Côte d'Azur et de la Faculté des Sciences. Le site de Valrose est facilement accessible par le tramway depuis la gare ou l'aéroport ou bien en voiture (proximité de l'autoroute A8). Les sessions plénières auront lieu dans le théâtre du château et les réunions de travail dans des salles à proximité. La salle du belvédère attenante au château permettra aux industriels qui le souhaitent d'exposer leurs produits et de discuter avec les congressistes

Le comité d'organisation des 4èmes Journées de la Chimiothèque Nationale-ChemBioFrance, aura le grand plaisir d'accueillir les membres de ChemBioFrance et leurs invités les 01 et 02 juin 2023.

Comité Scientifique des JCBF 2023

M. Jean-Luc Galzi (Strasbourg)

Directeur du GIS ChemBioFrance

Mme Florence Mahuteau-Betzer (Paris)

Directrice adjointe du GIS ChemBioFrance

M. Pascal Bonnet (Orléans)

Comité exécutif de ChemBioFrance

M. Bruno Figadère (Châtenay-Malabry)

Comité exécutif de ChemBioFrance

M. Didier Rognan (Strasbourg)

Comité exécutif de ChemBioFrance

Mme. Dominique Douguet (Nice)

Comité exécutif de ChemBioFrance

Mme. Marie-Odile Fauvarque (Grenoble)

Comité exécutif de ChemBioFrance

M. Pascal Villa (Strasbourg)

Comité exécutif de ChemBioFrance

M. Kiet Tran (Montpellier)

Comité exécutif de ChemBioFrance

Comité d'Organisation (Nice)

Mme Valérie Le Toullec (USCBF-CN)

M. Kiet Tran (USCBF-CN)

M. Frédéric Assié (USCBF-CN)

Mme Dominique Douguet (IPMC)

Mme Cécile Laredo (IPMC)

Mme Sylvie Bachellez (IPMC)

Mme Sophie Martini (ICN)

Mme Elena Leveille (ICN)

Le comité d'organisation des 4èmes Journées ChemBioFrance tient à remercier les partenaires publics et privés pour leurs contributions à la réussite de ces journées.

Sponsors

HAMAMATSU
PHOTON IS OUR BUSINESS

 **domiconus**
Conotoxins for health

 **Green
Pharma**

 **Enamine**

 **BMG LABTECH**
The Microplate Reader Company

 **BECKMAN
COULTER**
Life Sciences

Subventions

 **cnrs**

UNIVERSITÉ **CÔTE D'AZUR** 
ACADÉMIE D'EXCELLENCE
COMPLEXITÉ ET DIVERSITÉ
DU VIVANT

Partenaires

 **Institut de
Chimie de Nice**

 **ijmc**

 **CRCM**
Centre de Recherche
en Cancérologie de Marseille

Goodies

 **Inserm**
La science pour la santé
From science to health










Master Foqual
UNIVERSITÉ **CÔTE D'AZUR**
ACADÉMIE D'EXCELLENCE
COMPLEXITÉ ET DIVERSITÉ
DU VIVANT

 **Fragonard**
PARFUMEUR

Programme des 4^{èmes} Journées ChemBioFrance

Judi 1er juin 2023 - accueil à partir de 8h30

Accueil à partir de 8h30		Accueil <i>Château de Valrose</i>
10h00 - 12h00		Réunion du comité exécutif <i>Théâtre - Château de Valrose</i>
12h00 - 14h00		Buffet Déjeuner <i>Salle à manger, Château de Valrose</i>
14h00- 16h00		Réunion du bureau de la CN <i>Salle de séminaire de l'ICN</i> Atelier des chimiotécaires <i>Théâtre, chateau de Valrose</i> Réunion du pilier Criblage + ADME <i>Salle des actes, Château de Valrose</i> Réunion du pilier Chemoinformatique <i>Salle de convivialité de l'ICN</i>
16h00 - 16h30		Pause Café <i>Salle à manger, château de Valrose</i>
16h30 - 17h30		Réunion du bureau de la CN <i>Salle de séminaire de l'ICN</i> Atelier des chimiotécaires <i>Théâtre, chateau de Valrose</i> Réunion du pilier Criblage + ADME <i>Salle des actes, Château de valrose</i> Réunion du pilier Chemoinformatique <i>Salle de convivialité de l'ICN</i>
17h30-18h00		Restitution des ateliers <i>Théâtre - Château de Valrose</i>

Vendredi 2 juin 2023 - Château de Valrose

Accueil à partir de 8h00 8h30 - 10h30		Assemblée Générale du GIS ChemBioFrance <i>Théâtre - Château de Valrose</i>
10h30 - 11h00		Pause café et stands exposants <i>Salle à manger - Château de Valrose</i>
11h00- 11h30		Session communications Flash <i>Théâtre - Château de Valrose</i>
11h30- 12h00		Conférences invités <i>Théâtre - Château de Valrose</i>
12h00 - 14h00		Buffet déjeuner <i>Salle à manger, château de Valrose</i> stands exposants - Session Posters <i>Salle à manger, château de Valrose</i>
14h00 - 15h30		3 Conférences invitées <i>Théâtre - Château de Valrose</i>
15h30 - 15h45	Clôture	

Conférence n°1

**Nathalie Gros¹, Christine Chable-Bessia¹, Aymeric Neyret^{1,2}, Sébastien Lyonnais¹,
Liubov Cherkashchenko³, Andres Merits³ et Delphine Muriaux^{1,2}**

1-CEMIPAI UAR3725, CNRS & Université de Montpellier, Montpellier, France

2-IRIM UMR9004, CNRS & Université de Montpellier, Montpellier, France

3-Institute of Technology, University of Tartu, Tartu, Estonia

Systèmes de criblage pour la recherche de molécules antivirales contre les virus émergents

Le centre d'études des maladies infectieuses et pharmacologie anti-infectieuse, CEMIPAI est une plateforme mixte CNRS - Université de Montpellier mise à la disposition des chercheurs académiques et privés pour l'étude des virus pathogènes de classe 3 et pour la recherche de molécules antivirales ou anticorps neutralisants. Nous présentons ici notre virothèque et les systèmes de criblage mis au point et validés sur la plateforme, centrés sur les virus émergents : SARS-CoV-2 et arbovirus.

La pandémie liée à l'apparition du SARS-CoV-2 nous a conduit à développer des systèmes de production, de titration et de criblage contre ce virus pour une recherche rapide de molécules antivirales. Nous présentons ces systèmes, incluant (i) des systèmes de criblage sur différentes souches du virus SARS-CoV-2 et différents types cellulaires (VERO E6, A549-hACE2, Calu-3), (ii) des tests de micro-neutralisation sur échantillons de sérums, plasmas, salives. Ces systèmes sont calibrés par des molécules de référence et des anticorps neutralisants, associés à des tests de RT-qPCR. De nombreux projets ont ainsi pu être réalisés à façon et apporter appui à la réalisation de travaux académiques et privés.

Les arbovirus, dont les flavi- et alphavirus, représentent également un problème de santé publique majeur et une menace croissante autour de la Méditerranée et dans les DROM-COM. Le criblage de molécules contre ces virus reste un enjeu crucial pour l'identification de traitements anti-infectieux. Or, les génomes ARN des flavi- et alphavirus ont une faible tolérance aux insertions de gènes rapporteurs, les virus portant des modifications sont souvent génétiquement instables. Nous avons développé puis sélectionné dans ce contexte une nouvelle génération d'arbovirus (Chikungunya, Zika et Dengue-2) génétiquement modifiés et stables pour induire une fluorescence (mCherry, OxGFP) ou la production de NanoLuciférase dans les cellules infectées. Des systèmes de criblage de molécules ou d'anticorps ont ainsi pu être développés à partir de ces virus rapporteurs

Conférence n°2

Dr Jade Dussart-Gautheret

Equipe Molécule Bioactives, Institut Chimie de Nice, UMR 7272 CNRS

Université Côte d'Azur, 28 avenue Valrose, 06100 Nice, France

Phosphinates : des développements méthodologiques aux applications biomédicales

The main objective of our research group over the last years has been to develop new chemical strategies to address several challenging questions in biology and medicine using small organic molecules. It includes the development of new synthetic methodologies and disruptive drug discovery programs with the application of modern green organic, medicinal and phosphorus chemistry as well as chemical biology for the identification and validation of new biological targets.

The team has high contribution in the identification and validation of new bioactive molecules and novel relevant targets, particularly to overcome drug resistance in oncology.

In the last few years, we focused on the design and development of relevant synthetic methodologies of new organophosphorus compounds more precisely on H-phosphinate synthesis. Indeed, this relevant H-phosphinates derivatives represent an interesting scaffold in medicinal chemistry for the design of new of bioactive compounds.

Conférence n°3

Cédric GAGGIOLI^{1,2}, Laurence Bianchini³, Enora LECORGNE¹, Aline Mongis³, Audrey LAFON¹

1 Université Côte d'Azur, Inserm U1081, CNRS UMR 7284, IRCAN, plateforme 3D-Hub, 28 Avenue de Valombrose, 06107 Nice

2 Université Côte d'Azur, Inserm U1081, CNRS UMR 7284, IRCAN, Tumor Stroma Interactions, 28 Avenue de Valombrose, 06107 Nice

3 Université Côte d'Azur, Inserm U1081, CNRS UMR 7284, IRCAN, Genetics of solid tumors, 28 Avenue de Valombrose, 06107 Nice

3D Spheroid screening of the « National Essential Chemical Library » to identify inhibitors of dedifferentiated liposarcoma growth and invasion.

Cancer is the leading cause of death worldwide highlighting the urgent need to develop innovative methods in order to identify new generation anti-cancer treatments. Three-dimensional (3D) cell culture has recently emerged since such systems recapitulates more closely the complexity of solid tumor. Indeed, 3D cell culture models can recreate a complex tumor microenvironment including diffusion of oxygen, nutrients, waste and drugs where cellular interactions can be recapitulated. In this context, we developed the 3D-Hub-S platform, specialized in 3D multicellular tumor spheroids (MCTS) embedded into an extracellular matrix, enabling low or medium throughput screenings of anti-cancer drugs targeting cell proliferation, invasion and chemoresistance. Drug efficiency is evaluated by measuring the integrated density of the spheroid core and tumor cells invasion within the matrix using transmitted light microscopy acquisitions. Moreover, image-based analysis is confirmed by mitochondrial activity quantification through bioluminescence assay.

Here, using the 3D-Hub-S spheroids culture, we have screened the national essential chemical library to identify new inhibitors of dedifferentiated liposarcoma (DDLIP) growth and invasion. When diagnosed, surgical treatment is the main form of therapy for DDLIP, which is associated with a reported local recurrence rate of 41% to 52%, 15% distant metastatic rate, and 30% disease-related mortality rate. Anthracycline-based regimens, either as single agents or in combination with the alkylating drug ifosfamide, are the conventional first-line therapy for advanced illness. Unfortunately, this treatment hasn't always shown positive clinical results. Therefore, the creation of more potent, cutting-edge therapeutic approaches is required to treat DDLIP.

Conférence n°4

María Jesús Pérez de Vega

Instituto de Química Médica, IQM-CSIC, 28006 Madrid, Spain pdevega@iqm.csic.es

Invited Talk Polyhydroxy diphenyl propanones as PAMs of the $\alpha 7$ nAChR with analgesic activity

The $\alpha 7$ Nicotinic acetylcholine receptors ($\alpha 7$ nAChRs) are ligand gated channels widely expressed in the nervous system, implicated in several pathologies, like cognition disorders, schizophrenia, pain and inflammation. Allosteric modulation is especially attractive because it permits the selective regulation of these channels, and avoids many of the adverse effects associated with ligands that interact with the agonist binding site. After the initial screening of a heterogeneous collection of small natural products, a new series of polyhydroxy-substituted chalcones that behave as potent and selective positive allosteric modulators (PAMs) of $\alpha 7$ nAChR was identified. Optimization of the series by chemoselective reduction of the α, β -unsaturated carbonyl linker of the chalcone structure permitted the identification of polyhydroxy diphenyl propanones as new PAMs of the $\alpha 7$ nAChRs. Preliminary ADME studies indicated the need for additional optimization of the chemical structure. This prompted us to prepare some prodrugs and a new F-containing derivative with the aim of enhancing permeability and improving the pharmacokinetic profile. The biological characterization of the new compounds, including the results in an in vivo model of analgesia and in vitro studies to prove their neuroprotective capacity, showed the potential of this series. This work was supported by the Spanish Ministerio de Ciencia e Innovación: (MICINN) PID2021-126423OB.

Communication flash n°1

High throughput electrophysiology with FDSS μ CELL/EFS

Jean-Marc D'Angelo

Hamamatsu

Voltage-gated ion channels regulate many physiological functions and are targets for a number of drugs. Patch-clamps electrophysiology is the standard method for measuring channel activity. But it is laborious and costly. Here we will report during the short talk an automated instrument, a 96-Channel electrode array that is mounted on the FDSS μ cell/ μ CELL(Hamamatsu Photonics K.K, Hamamatsu, Japan), a high-throughput Kinetics microplate imager for cell-based fluorescent or Luminescence assays. The Electrical Field Stimulation (EFS) system is capable of delivering an electric field in 96 wells of a microplate at a living cells using specific fluorescent probes

Communication flash n°2

Titre

Xavier Saunier
Beckman

lorem ipsum

Communication flash n°3

Apprentissage machine pour le criblage des protéine-kinases.

Gilles Labesse

Centre de Biochimie Structurale UMR5048

L'utilisation d'apprentissage machine pour la prédictions des affinités et de la qualité des poses de ligands après amarrage dans le site actif des protéines-kinases par notre serveur @TOME, sera présenté.

Communication flash n°4

D'AD2P à MaSC : une réponse pour contrer les virus émergents

Guillemot Jean-Claude

Plateforme AFMB

Ces trois dernières années ont mis en évidence, pour certains, l'impact potentiellement dévastateurs des émergences virales. De bonnes nouvelles sont attendues prochainement dans le domaine des AMM pour de nouveaux antiviraux, et beaucoup de ces succès reposent sur l'expertise unique accumulée par la recherche académique. De plus, plusieurs stratégies d'identification de nouveaux antiviraux ont montré leurs limites, par exemple avec le criblage ayant comme finalité le repositionnement de médicaments existants.

Pour être en capacité de répondre à des criblages quantitativement plus importants, innovants, nous avons défini un périmètre nous permettant d'y répondre avec nos approches complémentaires de criblage. Nous sommes en capacité de cribler des chimiothèques de plus de 100 000 molécules, contre des cibles virales ou cellulaires, contre des isolats cliniques en P3, complété en aval par l'ensemble de nos essais orthogonaux, cellulaires, modèles petits animaux, approches structurales, et bien plus !

Poster n°1

Screening and profiling of bioactive molecules at the CMBA platform

Emmanuelle Soleilhac, Caroline Barette, Sophie Gerbaud, Stéphanie Bouillot, Marie-Odile Fauvarque

Univ. Grenoble Alpes, CEA, Inserm, IRIG, UA13, Plateforme de Criblage pour des Molécules Bioactives, 38000 Grenoble, France

Bioactive molecules are chemical compounds modifying the activity of a biological target in vitro or in vivo. Such molecules are critical for both drug discovery and the development of chemical tools to study protein function in a temporal and putatively reversible manner. Molecules selected from biochemical or enzymatic in vitro assays are used to disrupt full, or part, of protein activity whereas phenotypic screening based on in cellulo assays greatly enhances the probability to select molecules active in a living organism. The CMBA screening platform is an open facility managing more than 75,000 compounds, which helps in developing robust miniaturized assays and performs large-scale automated screens (HTS). We also develop innovative high-content protocols to monitor complex cell phenotypes using automated microscopy, for the high-content screening (HCS) of small chemical libraries or for the in-depth characterization of compounds of interest and their analogues, at the cellular level. In this frame, we have designed several in-house assays to establish the profiling of chemicals based on their bioactivity on the cell behavior or phenotype (viability, proliferation, apoptosis, migration, cytoskeleton, signaling, autophagy...) on cancerous and non-cancerous cells, on 2D or 3D (spheroids) models. Beside our activity of service, we aim at searching for molecules specifically interfering with members of the deubiquitinating enzymes family (DUBs) which mutations are associated with various diseases including chronic inflammation, cancer and neurodegeneration. To date, most of the hundred known DUBs have unknown substrates and only a handle of molecules targeting DUBs have been published. We address this issue by combining genetics, cell biology and chemogenomics approaches.

Poster n°2

Service d'ADME-Tox Illkirch

Claire Bourban

Service d'ADME-Tox Illkirch

Le processus de recherche de médicaments est long et fastidieux. Il nécessite de nombreuses études et un remaniement des molécules en cours de développement. L'évaluation des propriétés d'ADME-Tox (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion et Toxicité) doit être menée pendant les phases d'exploration, d'optimisation et de développement préclinique. Ces propriétés permettent de caractériser, de trier les composés et de prédire leur comportement après administration chez l'Homme. TechMedILL est un service de la Plate-forme de Chimie Biologique Intégrative de Strasbourg, située à l'ESBS, qui fournit des services dans le domaine de l'ADME-Tox. Le service travaille avec des laboratoires académiques et non-académiques (sociétés, start-up et entreprises privées) depuis 2008. Notre catalogue de tests comprend tous les aspects des propriétés ADME-Tox des petites molécules médicamenteuses. L'activité du service s'effectue selon les règles de qualité mises en place au laboratoire (Certification ISO 9001 et NF X50-900).

Poster n°3

Electric Field Stimulation Technique for High-Throughput Screening of Voltage-Gated Ion Channels.

Jean-Marc D'Angelo

Hamamatsu

Hamamatsu Photonics developed a 96-channel electrode array system that is mounted on the FDSS/ μ CELL. The Electric Field Stimulation (EFS) system is capable of delivering an electric field in 96 wells of a microplate at a time. The electrical stimulation allows the monitoring of the activity of voltage sensitive ion channels in living cells using specific fluorescent probes. The EFS system is a complementary system to electrophysiology techniques that can be used to rapidly screen the activity of compounds on voltage sensitive channels.

Two assays performed at the Institut de Génomique Fonctionnel (IGF) are presented here (Data from Dr. Vincent Compan). In a first assay, a primary culture of Hippocampal Neurons from newborn mice was used to monitor the calcium release with GCamp6s sensor upon stimulation of voltage sensitive channels at the plasma membrane. In a second assay, the effect of sodium channels blockers (TTX) on the transmembrane FluoVolt dye (Molecular Probes) was monitored using the Electrical Field Stimulation with variable voltage and frequencies.

Poster n°4

High-Throughput Experimentation

Eugénie Roméro-Laboureur

SCBM

High-Throughput Experimentation (HTE) allows for general reactions to be run at 1/8th (10 μmol) or 1/32th (2.5 μmol) normal reaction scale, cutting down the amount of substrates needed to find the optimum conditions. It also allows a high number of reaction conditions to be tested in parallel, and helps researchers to map the chemical space of a specific reaction. In the same time, HTE can be an rapid and cost-effective way to synthesize chemical libraries.

Inspired by the most important academic HTE center at UPenn, Philadelphia, the CEA has recently assembled a state-of-the-art academic laboratory designed to aid in the development of novel synthetic methodologies and solve challenges in difficult chemical transformations and embrace direct-to-biology approaches in drug discovery.

Poster n°5

Plateforme SynBio3, Synthèse de Biomolécules et de Biopolymères pour la Biologie

Pascal Verdié

Institut des Biomolécules Max Mousseron
Département de chimie des acides aminés, hétérocycles, peptides et protéines
Université de Montpellier

La plateforme SynBio3 a pour objectif de fournir aux programmes de recherche académiques et privés en sciences de la vie un approvisionnement rapide et fiable en molécules et polymères bioactifs. Au-delà de son rôle de plateforme de synthèse ouverte, SynBio3 vise à être un point d'accès unique à la communauté des biologistes qui donnera un élan puissant à la recherche interdisciplinaire et translationnelle. SynBio3 appartient à l'Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM) et repose sur une expertise unique à l'interface de la biologie et de la chimie. Par conséquent, SynBio3 fournit non seulement des percées techniques dans la chimie des biomolécules, mais permet également aux programmes scientifiques en biologie de démarrer et de se développer rapidement en fournissant les matériaux de départ nécessaires, depuis les composés de preuve de concept jusqu'aux structures élaborées. La principale caractéristique de SynBio3 est que les chercheurs peuvent non seulement trouver une installation pour réaliser la synthèse d'une molécule ou d'un polymère cible pour des applications dans le domaine de la santé, mais aussi une expertise scientifique large et approfondie pour les aider à mener leur projet interdisciplinaire et à trouver des solutions originales à leurs problèmes et à réaliser leurs percées scientifiques.

Créée en 2007 au sein du département acides aminés et peptides de l'IBMM et labellisée IBiSa en 2013, la plateforme SynBio3 s'est développée et est aujourd'hui constituée de deux installations : "Peptides et molécules bioactives" et "Polymères". Les deux installations technologiques sont hébergées à l'IBMM, au Pôle Chimie Balard de Montpellier, sous la responsabilité du Pr. Gilles Subra.

Poster n°6

PCBIS: Chemical libraries, biological models, technological tools and early ADMETox

Pascal Villa ¹, Adeline Obrecht ², Romain Hany ³, Claire Bourban ², Christel Valencia ², Valérie Calco ², Sophie Gioria ², Patrick Gizzi ², Bruno Didier ^{2, 4}, Claire Marsol ^{2, 4}, François Daubeuf ², Christine Lehalle ²

1 : Plate-forme de chimie biologique intégrative de Strasbourg (PCBIS)

CNRS : UMS3286, université de Strasbourg

ESBS et Fac de Pharmacie Illkirch - France

2 : PCBIS

CNRS, Université de Strasbourg

3 : Plate-forme de chimie biologique intégrative de Strasbourg

université de Strasbourg, Centre National de la Recherche Scientifique

4 : Laboratoire d'Innovation Thérapeutique

université de Strasbourg, Institut de Chimie du CNRS, Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7200

From assay development to lead characterization PCBIS proposes its expertise to contribute to the development of drug candidates:

- Assay development, miniaturization, automation and validation
- Screening of chemical libraries and extracts
- Early ADMETox evaluation to characterize compounds

www.pcbis.fr

last publications:

- Leroy C, Spelier S, Essonghe NC, Poix V, Kong R, Gizzi P, Bourban C, Amand S, Bailly C, Guilbert R, Hannebique D, Persoons P, Arhant G, Prévotat A, Reix P, Hubert D, Gérardin M, Chamailard M, Prevarskaya N, Rebuffat S, Shapovalov G, Beekman J, Lejeune F. Use of 2,6-diaminopurine as a potent suppressor of UGA premature stop codons in cystic fibrosis. *Mol Ther.* 2023 Jan 14;S1525-0016(23)00014-X. doi: 10.1016/j.ymthe.2023.01.014.

- Zeder-Lutz G, Bornert O, Fellmann-Clauss R, Knittel Obrecht A, Tranchant T, Bouteben S, Kaeffer J, Quillet R, Villa P, Wagner R, Lecat L and Simonin F. Characterization of anti-GASP motif antibodies that inhibit the interaction between GPRASP1 and G protein-coupled receptors. *Analytical Biochemistry* (2023) vol 665 March 2023. doi.org/10.1016/j.ab.2023.115071.

- Maujean T., Wagner P., Valencia C., Riché S., Iturrioz X., Villa P., Girard N., Karpenko J., Gulea M., Bonnet D. Rapid and Highly Selective Fluorescent Labeling of Peptides via a Thia-Diels-Alder Cycloaddition: Application to Apelin. *Bioconjugate Chem.* 2023, 34, 162-168. doi: 10.1021/acs.bioconjchem.2c00500.

- Eguida M., Schmitt-Valencia C., Hibert M., Villa P., Rognan D. Target-focused library design by pocket-applied computer vision and fragment deep generative linking. *J. Med. Chem.* 2022, 65, 13771-83. Doi :10.1021/acs.jmedchem.2c00931.

- Hany R, Leyris JP, Bret G, Mallié S, SarC, Thouaye M, Hamze A, Provot O, Sokoloff P, Valmier J, Villa P, Rognan D. High-throughput screening for extracellular inhibitors of the FLT3 receptor tyrosine kinase reveals chemically diverse and druggable negative allosteric modulators. *ACS Chem Biol* 2022, 18;17(3):709-722; DOI: 10.1021/acscchembio.2c00048

Liste des participants

NOM	PRENOM	UNITE/STE	MAIL
ALVES DE SOUSA	Rodolphe	LCBPT - UMR8601	Rodolphe.Alves-de-sousa@parisdescartes.fr
AMAND	Séverine	MNHN - MCAM	amand@mnhn.fr
ASSIE	Frédéric	USCBF-CN UAR3035	frederic.assie@cnrs.fr
BACH	Stéphane	Plateforme KISSf	bach@sb-roscoff.fr
BALLEREAU	Stéphanie	SCPMIB	stephanie.ballereau@univ-tlse3.fr
BARETTE	Caroline	plateforme CMBA - labo DS - IRIG	caroline.barette@cea.fr
BEAUPIERRE	Sandra	ICSN	sandra.beaupierre@cnrs.fr
BEAUVINEAU	Claire	CMBC - UMR9187-U1196	claire.beauvineau@curie.fr
BIGNON	Jérôme	Plateforme CIBI- ICSN	jerome.bignon@cnrs.fr
BOISARD	Caroline	Institut Chimie CNRS	caroline.boisard@cnrs-dir.fr
BOURBAN	Claire	PCBis	cbourban@unistra.fr
BOURG	Stéphane	ICOA	stephane.bourg@cnrs.fr
CALABRO	Kevin	MNHN - MCAM	kevin.calabro@mnhn.fr
CHABLE-BESSIA	Christine	CEMIPAI	christine.chable-bessia@cemipai.cnrs.fr
COMTE	Arnaud	UMR5246 ICBMS	arnaud.comte@univ-lyon1.fr
DALLEMAGNE	Patrick	CERMN - EA4258	patrick.dallemagne@unicaen.fr
DANEL	Mathieu	RESTORE	mathieu.danel@cnrs.fr
D'ANGELO	Jean-Marc	HAMAMATSU	jmdangelo@hamamatsu.fr
DELTHEIL (Goudet)	Amélie	SCBM	amelie.goudet@cea.fr
DIDIER	Bruno	Laboratoire d'Innovation Thérapeutique UMR7200	bdidier@unistra.fr
DOUGUET (Mme)	Dominique	Institut de Pharmacologie Moléculaire et Cellulaire UMR7275	douguet@ipmc.cnrs.fr
DUCA	Maria	ICN UMR7272	maria.duca@univ-cotedazur.fr
Dussart-Gautheret	Jade	Institut de Chimie de Nice Equipe Molécules bioactives	jade.DUSSART-GAUTHERET@univ-cotedazur.fr
EMICA	Bruno	HAMAMATSU	bemica@hamamatsu.fr
FAURE-ROY	Sophie	ICCF - UMR6296	Sophie.Faure@uca.fr

FAUVARQUE-MARRAS	Marie-Odile	Gen&Chem UMR1292 - IRIG CMBA/CEA	mofauvarque@cea.fr
FEUILLU	Laurianne	COBRA UMR6014	laurianne.feullu2@univ-rouen.fr
FIGADERE	Bruno	BioCIS UMR8076	bruno.figadere@u-psud.fr
FIORICCI	Sébastien	ICN - UMR7272	sebastien.fiorucci@univ-cotedazur.fr
GAGGIOLI	Cédric	IRCAN	cedric.gaggioli@univ-cotedazur.fr
GALZI	Jean-Luc	BSC UMR7242 USCBF-CN UAR3035	galzi@unistra.fr
GIZZI	Patrick	PCBis	patrick.gizzi@unistra.fr
GROS	Evelyne	EVOTEC	evelyne.gros@evotec.com
GROS	Nathalie	CEMIPAI Resp. Criblage	nathalie.gros@cemipai.cnrs.fr
GUILLARD-SABAS	Marianne	Laboratoire de Synthèse Organique ENSTA	marianne.guillard@ensta-paris.fr
GUILLEMOT	Jean-Claude	Plateforme AFMB	Jean-Claude.Guillemot@univ-amu.fr
HIBERT	Marcel	UNISTRA	mhibert@unistra.fr
HORVAT	Dragos	UNISTRA	dhorvath@unistra.fr
JACTEL	Vincent	CITCOM UMR8038	vincent.jactel@u-paris.fr
JAUFFRET	Philippe	USCBF-CN	ph.jauffret@gmail.com
JOGLAR	Jesus	IQAC-CSIC Institut de Chimie Avancée de Catalogne	joglar@iqac.csic.es
JULLIAN	Jean-Christophe	BioCIS UMR8076	jean-christophe.jullian@u-psud.fr
JUNG	Marie-Louise	GreenPharma	marielouise.jung@greenpharma.com
KHIAR	Nourredine	Institut de chimie de Séville	khiar@iiq.csic.es
KOUMBIS	Alexandros	University of Thessaloniki	akoumbis@chem.auth.gr
LABESSE	Gilles	Centre de Biochimie Structurale UMR5048	labesse@cbs.cnrs.fr
LE CLECH	Mikaël	USCBF-CN UAR3035	mikael.le-clech@cnrs.fr
LE TOULLEC	Valérie	USCBF-CN UAR3035	valerie.le-toullec@cnrs.fr
LEROUX	Florence	U01177 ARIADNE Criblage	florence.leroux@pasteur-lille.fr
LEVEILLE	Elena	ICN - UMR7272	elena.levaille@unice.fr
LITAUDON	Marc	ICSN	marc.litaudon@cnrs.fr

MAHUTEAU	Florence	UMR9187-U1196 CMBC	florence.mahuteau@curie.fr
MARES	Gary	GIP CYROI Unité BIO'R	g.mares@cyroi.fr
MARTINI	Sophie	ICN - UMR7272	sophie.martini@unice.fr
MARTIN-NAUD	Delphine	UMR9187 - U1196 CMBC	delphine.naud@curie.fr
MAULAY-BAILLY	Christine	MNHN - MCAM	cbailly@mnhn.fr
MEIERHENRICH	Uwe	Directeur ICN - UMR7272	Uwe.Meierhenrich@unice.fr
MORELLI	Xavier	CRCM	xavier.morelli@inserm.fr
MUNIER-LEHMANN	Hélène	Institut PASTEUR- Univ.Paris Cité	hmunier@pasteur.fr
NAHOUM	Virginie	Plateforme Intégrée de Criblage IPBS	virginie.nahoum@ipbs.fr
NGUYEN-PHAM	Khanh-Chi	Département de Pharmacologie Moléculaire UMR5250	khanh-chi.nguyen-pham@univ- grenoble-alpes.fr
PARANT-AURY	Sabrina	L2CM UMR7053	sabrina.aury@univ-lorraine.fr
PEREZ DE VEGA	Maria Jesus	Institut CSIC	direccion.iqm@csic.es
PEYROTTE	Suzanne	IBMM UMR5247	suzanne.peyrottes@umontpellier.f r
PIQUE	Valérie	ISM2 UMR7313	valerie.pique@univ-amu.fr
PIVETEAU	Catherine	INSERM U1177 - Drugs and Molecules for Living Systems	catherine.piveteau@univ-lille.fr
PREZEAU	Laurent	IGH Plateforme ARPEGE	laurent.prezeau@igf.cnrs.fr
RAMALHO	Ludovic	BMG LABTECH	Ludovic.Ramalho@bmglabtech.co m
REMUSAT	Vincent	ICR UMR7273	vincent.remusat@univ-amu.fr
RENAUDINEAU	Séverine	IPCM UMR8232	severine.renaudineau@sorbonne- universite.fr
RIVIERE	Matthieu	CEISAM UMR6230	matthieu.riviere@univ-nantes.fr
ROBERT	Thomas	Plateforme KISSf - FR2424	trobert@sb-roscoff.fr
ROBIN	Laurent	ICOA UMR7311	laurent.robin@univ-orleans.fr
ROCHE	Philippe	CRCM	philippe.roche@inserm.fr
ROGNAN	Didier	Laboratoire d'Innovation Thérapeutique UMR7200	rognan@unistra.fr

ROMERO-LABOUREUR	Eugénie	SCBM	eugenie.romero@cea.fr
SAUNIER	Xavier	Beckman Coulter	xsaunier@beckman.com
SIMORRE	Jean-Pierre	Institut Chimie CNRS	jean-pierre.simorre@cncs.fr
SOLEIHAC	Emmanuelle	Biologie et Biotechnologies pour la santé	emmanuelle.soleilhac@cea.fr
SPERANDIO	Olivier	Pasteur	olivier.sperandio@pasteur.fr
SUPLY	Thomas	Domiconus	thomas.suply@icloud.com
SUZANNE	Peggy	CERMN EA4258	peggy.suzanne@unicaen.fr
TRAN	Kiet	USCBF-CN UAR3035	kiet.tran@enscm.fr
TURCATTI	Gerardo	Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne	gerardo.turcatti@epfl.ch
TURCHI	Laurent	Université de Nice Côte d'Azur	turchi@unice.fr
TURLAIS	Fabrice	EVOTEC	Fabrice.Turlais@evotec.eu
VALLIN	Aurélié	LG2A UMR7378	aurelie.vallin@u-picardie.fr
VAUZEILLES	Boris	ICSN	boris.vauzeilles@cncs.fr
VERDIÉ	Pascal	IBMM UMR5247 Plateforme SynBio3	pascal.verdie@umontpellier.fr
VILLA	Pascal	PCBis UAR3286	pvilla@unistra.fr
WACKERLIG	Judith	Université de Vienne	judith.wackerlig@univie.ac.at
WAFFO TEGUO	Pierre	MIB EA4577 Unité de recherche œnologie	pierre.waffo-teguo@u-bordeaux.fr
WITEK	Aurélié	LG2A UMR7378	elodie.witek@u-picardie.fr
XHAARD	Henri	Université d'Helsinki	henri.xhaard@helsinki.fi