

# SECTEUR SANTÉ

Institut de recherche en biotechnologie

INFORMATION

[www.irb-bri.cnr-cnr.gc.ca](http://www.irb-bri.cnr-cnr.gc.ca)



## CHIMIE ET BIOLOGIE COMPUTATIONNELLES

La modélisation moléculaire et la simulation informatique sont les clés du succès de la **conception structurale des médicaments**. Le **criblage virtuel** des banques de composés est une application récente de la modélisation moléculaire qui réduit les coûts et augmente la probabilité de découvertes prometteuses. Malgré l'arrivée des technologies de criblage à haut rendement (HTS), la compression de telles banques demeure essentielle.

Le groupe de **Chimie et biologie computationnelles de l'IRB** concentre ses travaux sur le développement et l'application d'outils de calcul computationnel pour analyser, visualiser et prédire les affinités de fixation protéine-ligand pour les structures d'arrimage. Nous avons développé des modèles perfectionnés de solvation continue, des algorithmes efficaces de recherche conformationnelle et des modes de calcul fiables de l'énergie libre de fixation, fournissant ainsi des assises solides à la conception moléculaire par ordinateur et aux applications de criblage virtuel.

Nos modèles offrent une compréhension précise, à l'échelle atomique, de l'activité biologique nous permettant de prédire les changements structuraux en vue d'améliorer la **puissance** et la **spécificité** des ligands ou des inhibiteurs enzymatiques.

Nous visons à établir des **partenariats synergiques** avec les laboratoires universitaires et industriels afin de partager efforts, risques et coûts du développement de médicaments.

### Exemples de recherches

- ▶ Algorithmes de prédiction de l'énergie libre de fixation
- ▶ Technologie pour optimiser la complémentarité de charge de la fixation protéine-ligand
- ▶ Logiciel de criblage virtuel
- ▶ Conception d'inhibiteurs propeptidiques des cystéine-protéases
- ▶ Conception d'inhibiteurs non peptidiques de la cathepsine (en collaboration avec Synphar Laboratories)
- ▶ Conception d'inhibiteurs de la thrombine (en collaboration avec Biochem Pharma / Shire)
- ▶ Modélisation par homologie et arrimage de petites molécules inhibitrices d'une cible liée au cancer (en collaboration avec MethylGene)
- ▶ Cathepsine X : modélisation par homologie, prédiction d'une nouvelle activité carboxypeptidasique, modélisation des modes de fixation du substrat
- ▶ Domaines extracellulaires des récepteurs du TGF- $\beta$  de type I et II : modélisation par homologie, rationalisation des études de mutagenèse dirigée
- ▶ Luciférase : modélisation par homologie, arrimage de substrat
- ▶ Domaine de la formiminotransférase : modélisation de la diffusion dirigée du substrat

### Notre approche en affaires

Nous sommes flexibles et adaptons nos formules de collaboration aux besoins de nos partenaires. Nous offrons des services contractuels et des licences d'exploitation pour nos technologies. Collaborer avec l'IRB, c'est avoir accès à des technologies de pointe et à une équipe imposante et pluridisciplinaire, de scientifiques qui publient dans les revues scientifiques les plus prestigieuses.

**Appelez-nous pour optimiser votre recherche de nouveaux médicaments!**



Conseil national  
de recherches Canada

National Research  
Council Canada

Canada

« Nos spécialistes en modélisation mathématique ajoutent de la valeur à votre composé prototype. Ils raffinent sa conception moléculaire afin d'améliorer puissance et spécificité par une connaissance précise des interactions du prototype avec la cible. »

Dr Andrew Storer  
Directeur, Secteur Santé  
Institut de recherche en  
biotechnologie - CNRC

### Chimie et biologie computationnelles

Enrico Purisima  
Chef de groupe

Tél. : (514) 496-6343

Télé. : (514) 496-5143

[enrico.purisima@cnrc-nrc.gc.ca](mailto:enrico.purisima@cnrc-nrc.gc.ca)

Institut de recherche  
en biotechnologie - CNRC  
6100 avenue Royalmount  
Montréal, Québec  
H4P 2R2 Canada  
Tél. : (514) 496-6250  
Télé. : (514) 496-5007  
[www.irb-bri.cnr-cnr.gc.ca](http://www.irb-bri.cnr-cnr.gc.ca)  
[irb-bri@cnrc-nrc.gc.ca](mailto:irb-bri@cnrc-nrc.gc.ca)