



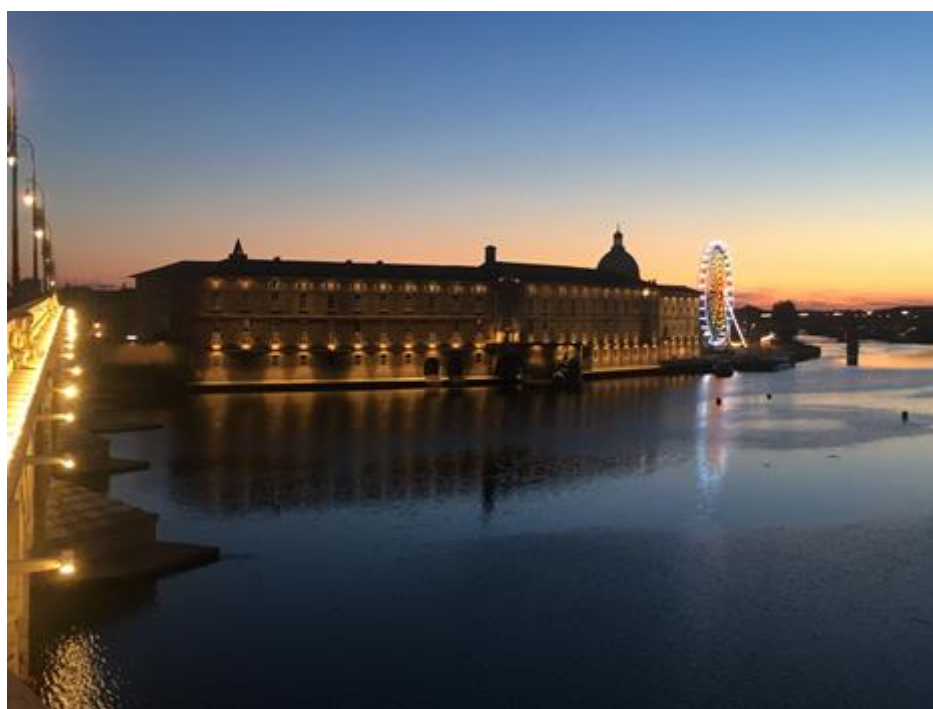
ChemBioFrance



Livret

**5^{èmes} Journées de la Chimiothèque Nationale -
ChemBioFrance**

30-31 mai 2024



Toulouse, Campus Rangueil

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 49 équipes, rattachées à 42 Organismes de recherche, Ecoles et Universités qui fournissent les molécules de la chimiothèque. Les laboratoires du LCC, RESTORE et SPCMIB sont des contributeurs de la Chimiothèque Nationale ;
- Une **plateforme de chémoinformatique** distribuée sur 8 sites ;
- Un réseau de 12 **plateformes de criblage** dont fait partie la plateforme PICT (Plateforme Intégrée de Criblage de Toulouse) ;
- Un réseau de deux **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 4 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 - ChemBioFrance 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, à Lyon (2022) puis Nice (2023).

Journées « Nationales » mais pas pas que

En effet, en 2023 à Nice, cet évènement a rassemblé une centaine de participants en présentiel dont 2 représentants de l'Institut de Chimie du CNRS et 7 partenaires chimistes européens (Suisse, Autriche, Espagne, Grèce, Finlande) qui ont contribué avec les membres de la Chimiothèque Nationale, à la création de la Fédération européenne des collections académiques nationales de composés (Eu-FNACC).

Mot des organisateurs

Au cœur du sud-ouest de la France, capitale de la région Occitanie, Toulouse est une métropole dynamique et attractive. Quatrième ville de France, elle cultive créativité et dynamisme. De l'époque cathare aux nouvelles technologies, de l'âge d'or du pastel à l'aventure aéronautique et spatiale, Toulouse est une ville effervescente, jeune et innovante, riche de ses 2 000 ans d'histoire. Toulouse est également une ville savante, une ville de chercheurs, d'ingénieurs et d'étudiants mondialement connue pour son industrie aéronautique et spatiale, ses universités et ses laboratoires de recherche en pointe dans la santé, les biotechnologies, les nanotechnologies, la robotique...

Les 5èmes Journées de la Chimiothèque Nationale - Chembiofrance auront lieu à Toulouse les 30 et 31 mai 2024 sur le site du campus de Rangueil de l'Université Toulouse III - Paul Sabatier.

Plus de 37 000 étudiantes, étudiants et 68 structures de recherche sont accueillis sur les neuf sites de l'Université. À travers ces sites, l'université participe au rayonnement économique et scientifique de la Région Occitanie et favorise le développement des territoires. L'Université Toulouse III - Paul Sabatier est une des plus grandes universités Françaises dans les domaines « sciences, santé, sport, technologie et ingénierie ». La forte implantation locale des organismes de recherche nationaux, partenaires des structures de recherche, contribue à la dynamique du site. Ainsi la plupart des instituts thématiques du CNRS sont représentés, de même que cinq des instituts thématiques multi-organismes de l'INSERM.

La délégation Occitanie Ouest du CNRS, tutelle de 61 structures de recherche, 16 laboratoires communs avec des industriels et 1 démonstrateur en biotechnologie gère près de 2 800 agents. Le CNRS en région Occitanie Ouest participe activement à la production de la connaissance et de l'innovation (près de 4 400 publications en 2022 et un portefeuille de 400 brevets actifs), tout en développant des partenariats actifs avec le monde industriel et l'international. L'INSERM est également fortement implanté en Occitanie Pyrénées, avec l'administration de 7 unités mixtes de recherche, 1 équipe de recherche labellisée, 1 centre d'investigation clinique et 2 unités mixtes de service, tous situés à Toulouse. Ces structures dépendent de 5 instituts thématiques : « Immunologie, inflammation, infectiologie et microbiologie », « Physiopathologie, métabolisme, nutrition », « Technologies pour la santé », « Cancer » et « Santé publique ».

Dans le domaine de la Santé, des partenariats locaux forts existent ainsi entre l'Université Toulouse III - Paul Sabatier, le CNRS, l'INSERM, le CHU de Toulouse et l'Institut Universitaire du Cancer de Toulouse (IUCT-Onco-pôle), l'Institut National de Recherche pour l'Agriculture, l'Alimentation et l'Environnement (INRAE), l'Institut de Recherche pour le Développement (IRD), l'Établissement Français du sang (EFS) ou encore l'École Nationale Vétérinaire de Toulouse (ENVT).

C'est dans cet environnement riche en recherche en sciences et en santé que se déroulera l'édition 2024 des Journées de la Chimiothèque Nationale - ChemBioFrance, et un hall permettra aux industriels qui le souhaitent d'exposer leurs produits et de discuter avec les congressistes.

Comité Scientifique des JCBF 2024

M. Jean-Luc Galzi (Strasbourg)

Directeur du GIS ChemBioFrance

Mme Florence Mahuteau-Betzer (Paris)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

M. Pascal Bonnet (Orléans)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

M. Bruno Figadère (Châtenay-Malabry)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

M. Didier Rognan (Strasbourg)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

Mme. Dominique Douguet (Nice)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

Mme Priscille Brodin (Lille)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

M. Pascal Villa (Strasbourg)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

M. Kiet Tran (Montpellier)

Comité de Direction du GIS ChemBioFrance

Comité d'Organisation (Toulouse)

M. Frédéric Assié (USCBF-CN)

Mme Stéphanie Ballereau (SPCMIB)

M. Mathieu Danel (RESTORE)

Mme Céline Deraeve (LCC)

M. Mikaël Le Clech (USCBF-CN)

Mme. Valérie Le Toullec (USCBF-CN)

Mme Emmanuelle Mothes (LCC)

Mme Virgine Nahoum (IPBS)












M. Kiet Tran (USCBF-CN)

Sponsors

Le comité d'organisation des 5èmes Journées de la Chimiothèque Nationale – ChemBioFrance tient à remercier les sponsors publics et privés pour leurs contributions à la réussite de ces journées.



Programme des JCBF 2024

| Jeudi 30 mai 2024 | | |
|---|---|--|
| 10h00 - 12h00 |  | Réunion Eu-FNACC (réservée aux membres du Comité Exécutif ChemBioFrance et partenaires européens) <i>(salle LCC)</i> |
| 11h45 - 14h00 |  | Buffet déjeuner <i>(hall LCC)</i> |
| 14h00 - 16h00 puis en parallèle 16h30 - 17h30 |  | Visite Evotec , puis <i>(au 2^{ème} étage du Bât.18)</i> : -Réunion entre la direction de ChemBioFrance et les partenaires Européens <i>(salle 1134)</i> -Réunion du pilier Chimiothèque Nationale <i>(salle 2129)</i> |
| | | Réunion du pilier Criblage + ADME <i>(salle IPBS)</i> |
| | | Réunion du pilier Chemoinformatique. <i>(salle LCC)</i> |
| 16h00 - 16h30 |  | Pause-café <i>(hall LCC)</i> |
| 19h30 |  | Diner "Brasserie les Beaux-Arts" Intervention de Mme Plagneux-Bertrand Vice-présidente de Toulouse Métropole- Chargée de l'industrie et de l'économie productive |
| Vendredi 31 mai 2024 | | |
| auditorium Marthe Condat Campus Ranguel Univ. Toulouse III | | |
| 8h30 - 10h30 |  | Assemblée Générale du GIS ChemBioFrance |
| 10h30 - 11h00 |  | Pause café et stands |
| 11h00 - 11h30 |  | Restitution des réunions des piliers |
| 11h30 - 12h00 | | Session communications Flash |
| 12h00 - 12h15 | | Communication Proméga |
| 12h15 - 13h45 |  | Buffet déjeuner et stands exposants - Session Posters |
| 13h45 - 15h45 |  | 4 conférences invitées Pr. Angelo Fontana (Institute of Biomolecule Chemistry, Naples) Dr. Bastien Gerby (Cancer Research Center of Toulouse) Dr. Pierre Le Pogam-Alluard (BioCIS, Paris Saclay) Dr. Gilles Marcou (Unité Chimie de la Matière Complexe, Strasbourg) |
| 15h45 - 15h50 |  | Clôture |

Conférence n°1

Pr. Angelo Fontana

Institute of Biomolecular Chemistry, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Via Campi Flegrei 34, IT-80078 Pozzuoli, Naples, Italy, angelo.fontana@cnr.it

Department of Biology of the University of Naples Federico II, Via Cinthia 12, IT-80126, Naples, Italy, angelo.fontana@unina.it

Marine Natural Products from Defense to Immunity

Systematic research of marine natural products started in the early 1960s but the pharmaceutical potential of marine organisms soon became clear with the discovery of the antiviral and anticancer nucleosides ara-A (vidarabine) and ara-C (cytarabine) used clinically for decades.^{1,2} Modern NMR and mass spectrometry approaches marked the golden age of the field and were crucial for the identification of thousands of secondary metabolites with complex carbon skeletons, often very different from their terrestrial counterparts, and new bioactivities based on previously unknown modes of action.³ However, only the advent of cellular and molecular techniques in the new century has finally paid off with the approval of Ziconotide (ω -conotoxin MVIIA) and Trabectedin (ecteinascidin-743), the first two complex molecules derived from marine-derived drug discovery.⁴

Discovery and development of marine natural products is currently dominated by bio-informatics and post-genomic strategies even if, despite the improvement of the analytical and computational tools, the identification and characterization of novel marine natural products still present challenges due to numerous technical barriers including quantities of rare compounds, supply of organisms, and screening protocols of salt-rich raw materials.⁵ Here I quickly review natural product research in our laboratory with a focus on the isolation, characterization, and synthesis of marine natural products with promising anticancer and immunomodulatory activities. The contribution will mainly focus on the selection and development of a class of marine sulfolipids, e.g. Sulfavant A (SULF A), that can stimulate cells of the innate immune system in order to potentiate the protective effects of anticancer vaccines or to enhance the removal of β -amyloid (A β) and lower cognitive and functional decline in Alzheimer's disease.⁶⁻⁸

References

1. Bergmann W. & Burke DC, *J. Org. Chem.* 1956, **22**, 226–228.
2. Bergmann W & Stempfen MF, *J. Org. Chem.* 1957, **22**, 1575–1577.
3. Carroll AR, Copp BR, Grkovic T, Keyzers RA, Prinsep MR, *Nat Prod Rep.*, 2024, **41**, 162-207.
4. Molinski TF, Dalisay DS, Lievens SL, Saludes JP. *Nat Rev Drug Discov.* 2009, **8**, 69-85.
5. Atanasov AG, Zotchev SB, Dirsch VM, *Nat Rev Drug Discov.* 2021, **20**, 200-216.
6. Manzo E, Cutignano A, Pagano D, Gallo C, Barra G, Nuzzo G, Sansone C, Ianora A, Urbanek K, Fenoglio D, Ferrera F, Bernardi C, Parodi A, Pasquale G, Leonardi A, Filaci G, De Palma R, Fontana A., *Sci Rep.* 2017, **7**, 6286.
7. Gallo C, Manzo E, Barra G, Fioretto L, Ziaco M, Nuzzo G, d'Ippolito G, Ferrera F, Contini P, Castiglia D, Angelini C, De Palma R, Fontana A, *Cell Mol Life Sci.* 2022, **79**, 369.
8. Barra G, Gallo C, Carbone D, Ziaco M, Dell'Isola M, Affuso M, Manzo E, Nuzzo G, Fioretto L, D'Ippolito G, De Palma R, Fontana A, *Front Immunol.* 2023, **14**, 1050113.

Conférence n°2

Dr Bastien Gerby

Centre de Recherches en Cancérologie de Toulouse
2 Av. Hubert Curien, 31100 Toulouse

Oncogene-induced reprogramming in B-acute lymphoblastic Leukemia: Towards targeted therapy of leukemia initiating cells.

B-cell acute lymphoblastic leukemia (B-ALL). Defined as the most frequent pediatric cancer, B-ALL is a multi-step disease characterized by the acquisition of diverse genetic alterations. B-ALL are classified into different oncogenic subgroups established according to the identity of the first oncogenic event carried in the leukemic cells such as ETV6-RUNX1, TCF3-PBX1, BCR-ABL1 translocations or PAX5 alterations (fusion transcripts, P80R mutation). Although current chemotherapy is efficient at reducing the tumor load by targeting proliferating leukemic cells, the disease relapse points to the presence of resistant cells that can escape treatment and cause recurrence. Thus, the biological properties of the tumor including cell plasticity, sustained self-renewal activity, cell-quiescence and drug-resistance, can significantly affect leukemia treatment and should be considered in the search for new targeted therapies against leukemia-initiating cells (1).

Modeling the multi-step process of B-ALL. In this context, our team developed an engineered mouse model expressing the primary oncogene PAX5::ELN that accurately reproduces the key features of leukemia development through the acquisition of secondary mutations (2). Our team explored the pre-leukemic phase of the disease and demonstrated that PAX5::ELN induces the emergence of quiescent pre-leukemic stem cells (pre-LSCs) that exhibit abnormal self-renewal properties, are resistant to chemotherapies and sustain the leukemia initiation. Moreover, pre-LSC signature is associated with the reprogramming of stem cell-like features and is comparable to human B-ALL chemo-resistant cells in xenograft models. Together, the data demonstrate that PAX5::ELN reprograms stem cell-like molecular and functional properties in a subset of normal B-cell progenitors and converts them into non-cycling and resistant pre-LSCs (3).

Targeting leukemia initiating activity. We therefore designed a robust in vitro protocol for the screening of compounds targeting primary pre-LSC-enriched population induced by PAX5::ELN. The multiparametric readout based on immunophenotypic characterization takes into account the intrinsic complexity and the differentiation of primary B-cells. Thus, we screened a bank of 1040 natural and synthetic compounds in collaboration with the French National Compound Library (Chimiothèque Nationale Essentielle) and we identified a new compound affecting pre-LSC viability. Designed by the SPCMIB laboratory from the University of Toulouse, this molecule belongs to the benzodiazepine family. In close collaboration, our project now aims to develop analogs to identify a new drug candidate targeting pre-LSC activity and resistance.

References :

1. Fregona V, Bayet M, Gerby B. Oncogene-Induced Reprogramming in Acute Lymphoblastic Leukemia: Towards Targeted Therapy of Leukemia-Initiating Cells. *Cancers (Basel)*. 2021;13(21).
2. Jamrog L, et al. PAX5-ELN oncoprotein promotes multistep B-cell acute lymphoblastic leukemia in mice. *Proc Natl Acad Sci U S A*. 2018;115(41).
3. Fregona V, et al. Stem cell-like reprogramming is required for leukemia-initiating activity in B-ALL. *J Exp Med*. 2024;221(1).

Conférence n°3

Dr Gilles Marcou

Laboratoire de Chémoïnformatique

Unité Mixte de Recherche Chimie de la Matière Complexe – UMR 1740

Institut Le Bel - 4 rue Blaise Pascal – 67081 Strasbourg

New solubility models for the Chimiothèque Nationale

The Chimiothèque Nationale has acquired DMSO solubility data, thermodynamic and kinetic aqueous solubility data. These data result from contribution of chimiothéquaires, screening projects on the Chimiothèque Nationale Essentielle version 1 and 2 (CNE1 and CNE2). They have been supplemented by public datasets after a comprehensive review of literature. This talk will present the datasets, new insights about data quality and relations between kinetic and thermodynamic aqueous solubility, and the new models derived from these data. These models are used to provide additional annotations to the Chimiothèque Nationale.

Conférence n°4

Dr Pierre Le Pogam-Alluard

Équipe “Chimie des Substances Naturelles” BioCIS, CNRS, Université Paris-Saclay,
17 Avenue des Sciences, 91400 Orsay, France

From historical chemical heritage to the modern era of data sharing and open science

This aim of this presentation is to outline our recent efforts in valorizing the collection of structurally diverse metabolites accumulated in our laboratory over more than six decades of research in the field of natural product chemistry. Through the specific example of our laboratory, this talk aims at presenting the analytical workflow that has been adopted to identify new entries to be added to the ChemBioFrance repositories, including some difficulties associated with such an initiative. Although the main driver of these efforts has been the contribution to the ChemBioFrance initiative, some of the scientific achievements and projects that have resulted from these efforts will also be briefly discussed. For example, the acquisition of large-scale MS/MS fingerprints linked to our collections has provided us with a unique opportunity to disseminate analytical data linked to our often unique products, which are now made available to all through the GNPS¹ repositories for annotation through the upload of two MS/MS databases out of our chemical patrimony so far.^{2,3} In the course of curating these data, it also become apparent that some specific compounds deserved a spectroscopic reassessment as doubts existed as to the validity of their structures, or they had not been fully elucidated at the time they had been isolated. Since most of these entries are unique to our collections, only us could have undertaken these structural reassessments that sometimes led to structural clarifications,⁴ to stereochemical (re)assignments^{5,6} or to planar structure revision.^{7,8} Through these few recent examples, we hope to demonstrate the value of taking an interest in the (natural) product collections present in our laboratories, whose value now goes far beyond the sharing of physical samples, to include the provision of spectroscopic data accessible to all, as well as the updating of knowledge on ancient products, accessible only to the holders of the original sample.

References :

- 1 Wang et al., Nature Biotechnol., 2016, 34, 828-837.
- 2 Fox Ramos et al., Sci. Data, 2019, 6, 15.
- 3 Agnès et al., Sci. Data, 2022, 56, 12332-12335.
- 4 Retailleau et al., Metabolites, 2023, 13, 470.
- 5 Beniddir et al., Phytochemistry, 2023, 212, 113741.
- 6 Otego N’Nang et al., J. Nat. Prod., 2023, 86, 1202-1210.
- 7 Jagora et al., J. Nat. Prod., 2021, 84, 2617-2622.
- 8 Kouamé et al., Org. Lett., 2021, 23, 5964-5968.

Communication flash n°1

Olivier Sperandio

Laboratoire de Chémoinformatique et protéochémométrie

Unité de bioinformatique structurale

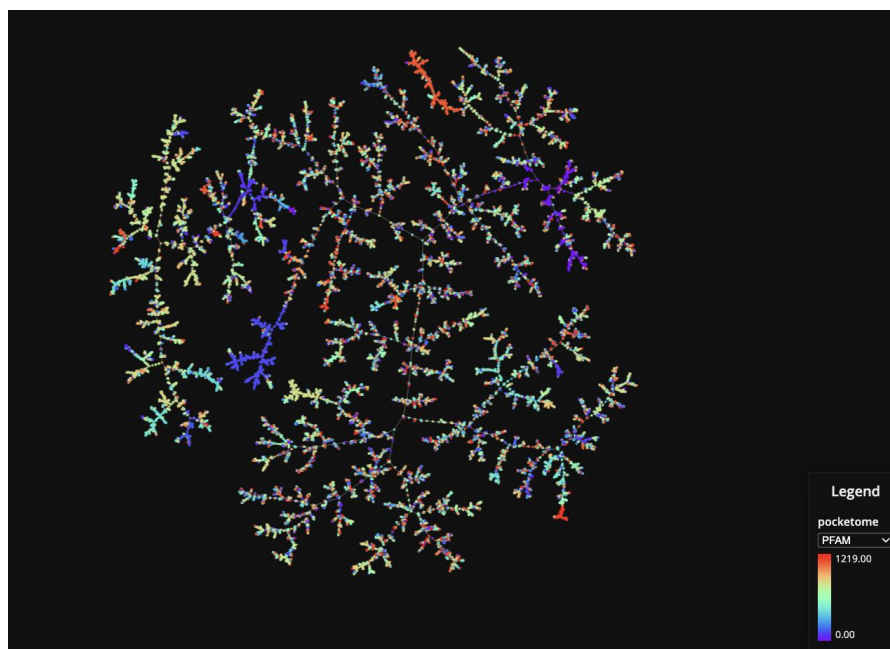
Institut Pasteur - 28 Rue du Dr Roux, 75015 Paris, France

A pocket-driven approach to the design of molecular probes against protein-protein interactions.

We are excited to unveil a vast dataset for studying Protein-Protein Interactions (PPIs) and aiding drug design initiatives. This dataset¹ provides intricate details on PPI-related and ligand-binding pockets, featuring structural data for over 23,000 pockets, 3,700 proteins across 500 organisms and 1,700 protein families. This valuable tool enhances biological insights and aids the drug discovery process. It includes almost 3,500 ligands and introduces a novel metric for comparing pocket similarity, giving researchers exceptional resources to study disease-specific PPIs, understand binding specificity, and hasten the identification of potential drug targets. Applicable broadly in fields such as structural biology, bioinformatics, and personalized medicine, our dataset enables advanced computational analysis, fostering effective hypothesis generation and scientific validation.

Access to this dataset is available via our Protein Interaction Explorer at <https://ippidb.pasteur.fr/targetcentric>. This platform also integrates our InDeep tool, which predicts PPI-related functional binding sites, identifies critical hot spots with FoldX, and allows for the mapping of known ligands to their respective PPI targets. Our pocket similarity metric defines the PPI pocketome, which can be explored interactively.

Discover more about its practical applications at our upcoming flash presentation.



PPI pocketome represented as a minimum spanning tree or TMAP. Pockets are depicted as nodes and pocket similarities as connected nodes in the minimum spanning tree.

Related publication:

1. Moine-Franel, A., Mareuil, F., Nilges, M., Ciambur, C. B. & Sperandio, O. A comprehensive dataset of protein-protein interactions and ligand binding pockets for advancing drug discovery. *Sci Data* **11**, 402 (2024).

Communication flash n°2

Sandra Bourgeade-Delmas

Unité Mixte de Recherche 152

PHARMADEV (Pharmacochimie et biologie pour le développement)

Université Toulouse 3 Paul Sabatier, Faculté de Pharmacie,

35 chemin des maraîchers - 31062 Toulouse Cedex 9

Présentation du plateau technique de biologie cellulaire UMR152-PHARMADEV

Le plateau technique de biologie cellulaire développe et utilise sous forme de prestations des modèles cellulaires et parasitaires afin de sélectionner des extraits ou des molécules bioactives qui pourraient être utilisées comme candidats médicaments ou comme outils pour la recherche fondamentale. Au-delà, le plateau technique peut accompagner les scientifiques sur des projets de recherche depuis la conception de tests jusqu'à leur validation.

Matériels et équipements : laboratoire de type P2 -3 microscopes optiques (dont 2 inversés) -1 microscope à fluorescence -2 PSM -1 incubateur à CO₂, 37°C -1 incubateur 24°C -1 lecteur de luminescence/fluorescence -1 bain à ultrasons.

Les modèles parasitaires étudiés au sein du plateau techniques sont :

- La Leishmaniose : les tests de criblage peuvent être réalisés sur 3 formes du parasite : – les promastigotes procycliques : forme du parasite présente dans l'intestin du phlébotome – les amastigotes axéniques : obtenues in vitro dans un système de culture permettant de faire abstraction de la cellule hôte. – les amastigotes intramacrophagiques: modèle in vitro le plus représentatif du modèle in vivo L'espèce disponible pour ces tests est *L. infantum* transfectée avec la luciférase A venir : tests in vivo
- Le Paludisme : les tests de chimiosensibilité permettent le criblage de molécules ou d'extraits sur les formes sanguines du parasite L'espèce disponible pour ces tests est *Plasmodium falciparum* FcB1

Enfin, le plateau technique propose des tests de cytotoxicité de molécules ou extraits sur différentes lignées cellulaires : Hela, HepG2, J774A.1, IEC-6, HT-29, Thp1, Caco-2 et Véro.

Communication flash n°3

Fabrice Turlais

Evotec (France) SAS

Campus Curie

195, route d'Espagne

31036 Toulouse CEDEX (France)

L'expertise des équipes SM Evotec dans le support aux projets scientifiques

Nous présenterons notre capacité à soutenir les essais biologiques des projets avancés (Lead Op) avec des composés qui sont synthétisés toutes les semaines.

Communication flash n°4

Adeline Trillat

Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs)

Tour Sébastopol 3 quai Kléber 67000 Strasbourg France

Créer vos bases de données numériques

Avec ACD/labs, vous pouvez créer vos bases de données de composés chimiques, en y associant les données analytiques, les metadata, les images et les documents que vous souhaitez. Ces bases de données ont vocation à être collaborative et à centraliser et échanger les informations et connaissances.

Communication flash n°5

Xavier Saunier
Beckman Coulter

An introduction to our liquid handling portfolio

As experts in fluidtransferology, we now offer a broader range of flexible, scalable liquid handling solutions for NGS, genomic, cellular, protein and other workflows—for research areas such as drug discovery, biopharma, agriculture, synthetic biology, forensics and more.

Whether it's acoustic dispensing, tip-based liquid handling or fully integrated systems—we have the expertise and breadth of capabilities to expand your scientific boundaries, maximize your budget and rapidly drive your discoveries

Communication Proméga

Julie Conkright-Fincham

Strategic Collaboration Manager. Promega Corporation US. 2800 Woods Hollow Rd. Madison, WI 53711. USA

HiBiT Bioluminescent System: A Tiny Tag Providing Powerful Protein Detection Assays for High Throughput Screening

The field of drug discovery and research is currently experiencing significant advancements due to the development of new bioluminescent technologies. A notable innovation in this area is a highly sensitive and versatile bioluminescent system, optimized for a broad spectrum of screening applications in high throughput screening (HTS). At the core of this platform is the HiBiT bioluminescent tag, an 11 amino acid sequence designed for easy attachment to target proteins either for overexpression or integration into genes via CRISPR, enabling the monitoring of endogenous protein expression. This tag, when combined with the larger LgBiT protein, forms a luminescent complex that allows for a direct and highly sensitive measurement of protein levels across various HTS applications.

This system is adept at supporting both lytic and live cell assays, enhancing the detection of protein expression, secretion, stability, receptor surface expression and internalization, target cell killing, as well as the stages of the viral lifecycle, including infection, replication, and release. Specific examples of these applications will be discussed to illustrate their impact on enhancing HTS capabilities.

The commitment to advancing biomedical research includes fostering strong partnerships with screening platforms, particularly in supporting assay development and enhancing screening efforts. Specific programs are in place to assist academic researchers in leveraging these advanced technologies for their HTS projects, with the aim of accelerating the understanding of complex biological processes and the development of new therapeutics.

Poster n°1

DELs to NanoBRET Probes

Florian Mignot

Promega France

24 chemin des Verrières

69260 Charbonnières-les-Bains

Enabling Cell-Active Target Engagement Since its discovery, DNA encoded library (DEL) technology has evolved into an essential tool to rapidly identify novel small molecules for early-stage drug discovery. DEL technology utilizes a unique design which connects structural information with DNA barcodes. This design has enabled rapid affinity-based screening against purifiable protein targets and has allowed for exploration of chemical diversity at a scale not possible with traditional small molecule libraries. Herein, we describe a workflow that exploits the bifunctional nature of DEL ligands as an approach generate probes for live cell target engagement studies. NanoBRET is a proximity-based assay that measures compound target engagement using bioluminescence resonance energy transfer (BRET) technology. Proof of concept of our workflow was established by performing a DEL screen against aurora kinase A and successfully converting aurora DEL ligands into cell-active NanoBRET probes. Aurora kinase NanoBRET probes then enabled the validation and hit prioritization of the initial chemical series identified during the DEL selection. We also evaluated the effective repurposing of pre-existing DEL screen data (BRD4 and IDO1) and found suitable leads for NanoBRET probe development. Our findings support the use of DEL workflows as an engine to create cell-active NanoBRET probes independent of structure or compound SAR. The combination of DEL and NanoBRET technology should accelerate hit-to-lead studies in a live cell setting.

Poster n°2

La Plate-forme ARPEGE

Laurent Prézeau

Institut de Génomique Fonctionnelle

141 Rue de la Cardonille, 34000 Montpellier

La Plate-forme ARPEGE, des solutions pour des criblages et des analyses pharmacologiques et fonctionnelles des Récepteurs couplés aux protéines G.

Poster n°3

A pocket-driven approach to the design of molecular probes against protein-protein interactions.

Olivier Sperandio

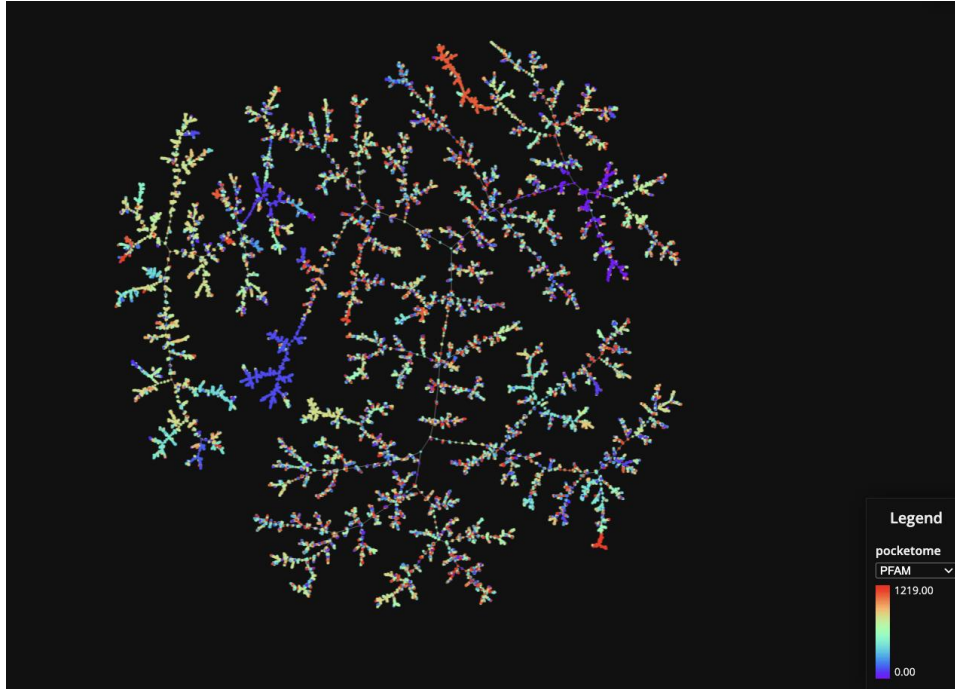
Laboratoire de Chémoinformatique et protéochémométrie

Unité de bioinformatique structurale

Institut Pasteur - 28 Rue du Dr Roux, 75015 Paris, France

We are excited to unveil a vast dataset for studying Protein-Protein Interactions (PPIs) and aiding drug design initiatives. This dataset¹ provides intricate details on PPI-related and ligand-binding pockets, featuring structural data for over 23,000 pockets, 3,700 proteins across 500 organisms and 1,700 protein families. This valuable tool enhances biological insights and aids the drug discovery process. It includes almost 3,500 ligands and introduces a novel metric for comparing pocket similarity, giving researchers exceptional resources to study disease-specific PPIs, understand binding specificity, and hasten the identification of potential drug targets. Applicable broadly in fields such as structural biology, bioinformatics, and personalized medicine, our dataset enables advanced computational analysis, fostering effective hypothesis generation and scientific validation.

Access to this dataset is available via our Protein Interaction Explorer at <https://ippidb.pasteur.fr/targetcentric>. This platform also integrates our InDeep tool, which predicts PPI-related functional binding sites, identifies critical hot spots with FoldX, and allows for the mapping of known ligands to their respective PPI targets. Our pocket similarity metric defines the PPI pocketome, which can be explored interactively.



PPI pocketome represented as a minimum spanning tree or TMAP. Pockets are depicted as nodes and pocket similarities as connected nodes in the minimum spanning tree.

Related publication:

1. Moine-Franel, A., Mareuil, F., Nilges, M., Ciambur, C. B. & Sperandio, O. A comprehensive dataset of protein-protein interactions and ligand binding pockets for advancing drug discovery. *Sci Data* **11**, 402 (2024).

Poster n°4

PICT: Plateforme Intégrée de Criblage de Toulouse

Virgine Nahoum

PICT - Plateforme Intégrée de Criblage de Toulouse (PICT)

205 Route de Narbonne, Toulouse, France

Poster n°5

PCBIS: Assay development, HTS and ADMET

Pascal Villa

Plateforme de chimie biologique intégrative de Strasbourg
300 Boulevard Sébastien Brant, Illkirch-Graffenstaden, France

Poster n°6

CEMIPAI : Plateforme de criblage pour la recherche de molécules antivirales contre les virus émergents de classe 3

Nathalie Gros

Centre d'Etudes des Maladies Infectieuses et Pharmacologie Anti-Infectieuse (CEMIPAI)
1919 Route de Mende, Montpellier, France

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 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 NanoLuciferase dans les cellules infectées. Des systèmes de criblage de molécules ou d'anticorps ont ainsi pu être développés à partir de ces virus rapporteurs.

Poster n°7

Présentation du plateau technique de biologie cellulaire UMR152-PHARMADEV

Sandra Bourgeade-Delmas

Unité Mixte de Recherche 152

PHARMADEV (Pharmacochimie et biologie pour le développement)

Université Toulouse 3 Paul Sabatier, Faculté de Pharmacie,

35 chemin des maraîchers - 31062 Toulouse Cedex 9

Le plateau technique de biologie cellulaire développe et utilise sous forme de prestations des modèles cellulaires et parasitaires afin de sélectionner des extraits ou des molécules bioactives qui pourraient être utilisées comme candidats médicaments ou comme outils pour la recherche fondamentale. Au-delà, le plateau technique peut accompagner les scientifiques sur des projets de recherche depuis la conception de tests jusqu'à leur validation.

Matériels et équipements : laboratoire de type P2 -3 microscopes optiques (dont 2 inversés) -1 microscope à fluorescence -2 PSM -1 incubateur à CO₂, 37°C -1 incubateur 24°C -1 lecteur de luminescence/fluorescence -1 bain à ultrasons.

Les modèles parasitaires étudiés au sein du plateau techniques sont :

- La Leishmaniose : les tests de criblage peuvent être réalisés sur 3 formes du parasite : – les promastigotes procycliques : forme du parasite présente dans l'intestin du phlébotome – les amastigotes axéniques : obtenues in vitro dans un système de culture permettant de faire abstraction de la cellule hôte. – les amastigotes intramacrophagiques: modèle in vitro le plus représentatif du modèle in vivo L'espèce disponible pour ces tests est *L. infantum* transfectée avec la luciférase A venir : tests in vivo
- Le Paludisme : les tests de chimiosensibilité permettent le criblage de molécules ou d'extraits sur les formes sanguines du parasite L'espèce disponible pour ces tests est *Plasmodium falciparum* FcB1

Enfin, le plateau technique propose des tests de cytotoxicité de molécules ou extraits sur différentes lignées cellulaires : HeLa, HepG2, J774A.1, IEC-6, HT-29, Thp1, Caco-2 et Véro.

Poster n°8

Conception d'une banque de fragment fluorés générique et criblage par RMN ^{19}F sur la protéine cible InhA.

Dunkan B. ¹, Tamhaev R. ^{1,2}, Ramos P. ¹, Nahoum V. ¹, Ballereau S. ², Lherbet C. ², Genisson Y. ², Maveyraud L. ¹, Mourey L. ¹, et Saurel O. ¹

¹ Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale (IPBS), Université de Toulouse, CNRS, Université Toulouse III – Paul Sabatier (UT3), Toulouse, France

² Synthèse et Physico-Chimie de Molécules d'Intérêt Biologique (LSPCMIB), UMR 5068, CNRS, Université Toulouse III – Paul Sabatier (UT3), Toulouse, France

L'identification de molécules organiques de bas poids moléculaire se liant aux protéines à partir de collection de composés est la première étape dans le développement de candidats médicaments. La RMN est une méthode de choix pour identifier les interactions ligands-protéine. Devant la complexité des molécules étudiées, la RMN du ^1H peut être limitée par un recouvrement des signaux qui limite l'identification des ligands. Une alternative consiste à détecter le fluor (^{19}F), peu abondant il évite tout bruit de fond et il est plus sensible que le proton aux interactions moléculaires. Ce projet vise un double objectif, (i) constituer d'une banque dédiée molécules fluorées générique et (ii) tester cette fragmentothèque à travers criblage par RMN ^{19}F sur la protéine cible InhA. L'énoyl reductase InhA est une enzyme d'intérêt pharmacologique impliquée dans la biosynthèse des acides gras de la paroi externe de *Mycobacterium tuberculosis* et cible de l'isoniazide, antibiotique de première ligne lors du traitement de la tuberculose. Nous avons constitué une chimiothèque de 250 fragments fluorés. Cette fragmentothèque a été validée par un criblage par RMN du ^{19}F . Ce criblage a permis d'identifier un nombre élevé de « touches ». Parmi les 44 touches, 26 ciblent le site catalytique de l'enzyme avec deux modes de liaisons différents.

Poster n°9

New solubility models for the Chimiothèque Nationale

Dr Gilles Marcou

Laboratoire de Chémoinformatique

Unité Mixte de Recherche Chimie de la Matière Complexe – UMR 1740

Institut Le Bel - 4 rue Blaise Pascal – 67081 Strasbourg

The Chimiothèque Nationale has acquired DMSO solubility data, thermodynamic and kinetic aqueous solubility data. These data result from contribution of chimiothéquaires, screening projects on the Chimiothèque Nationale Essentielle version 1 and 2 (CNE1 and CNE2). They have been supplemented by public datasets after a comprehensive review of literature. This talk will present the datasets, new insights about data quality and relations between kinetic and thermodynamic aqueous solubility, and the new models derived from these data. These models are used to provide additional annotations to the Chimiothèque Nationale.

Liste des participants

| NOM | Prénom | Mail | Laboratoire/Société |
|-------------------|-----------|---|---|
| ALVES DE SOUSA | Rodolphe | Rodolphe.Alves-de-sousa@parisdescartes.fr | LCBPT - UMR 8601 |
| AMAND | Séverine | amand@mnhn.fr | Unité MCAM - UMR 7245 |
| ARMELAO | Lidia | lidia.armelao@cnr.it | Consiglio Nazionale delle Ricerche Rome - ITALIE |
| ASSIE | Frédéric | frederic.assie@cnsr.fr | USCBF-CN UAR 3035 |
| ATKINSON | Andrew | andrew.atkinson@ipbs.fr | IPBS |
| BALLEREAU | Stéphanie | ballereau@chimie.ups-tlse.fr | SPCMIB |
| BARETTE | Caroline | caroline.barette@cea.fr | plateforme CMBA/ labo DS/ IRIG |
| BEAUVINEAU | Claire | claire.beauvineau@curie.fr | CMBC UMR9187 - U1196 |
| BIGNON | Jérôme | jerome.bignon@cnsr.fr | Plateforme CIBI - ICSN |
| BOISARD | Caroline | caroline.boisard@cnsr-dir.fr | CNRS Chimie |
| BONNET | Pascal | pascal.bonnet@univ-orleans.fr | ICOA |
| BOURG | Stéphane | stephane.bourg@cnsr.fr | ICOA |
| BOURGEADE-DELMAS | Sandra | sandra.bourgeade-delmaz@ird.fr | Unité Mixte de Recherche 152 PHARMADEV (Pharmacochimie et biologie pour le développement) |
| BRODIN | Priscille | priscille.brodin@inserm.fr | Center for Infection and Immunity of Lille - U1019 - UMR 9017 |
| CALABRO | Kevin | kevin.calabro@mnhn.fr | Unité MCAM - UMR 7245 |
| CHABLE-BESSIA | Christine | christine.chablebessia@cemipai.cnsr.fr | CEMIPAI |
| CHIARAVALLI | Jeanne | jeanne.chiaravalli@pasteur.fr | Plateforme de Criblage ChémoGénomique et Biologique (PF-CCB) - Institut Pasteur |
| COMTE | Arnaud | arnaud.comte@univ-lyon1.fr | ICBMS - UMR 5246 |
| CONKRIGHT-FINCHAM | Julie | julie.conkright-fincham@promega.com | PROMEGA |
| DANEL | Mathieu | mathieu.danel@cnsr.fr | RESTORE - UMR 5070 |
| D'ANGELO | Jean-Marc | jmdangelo@hamamatsu.fr | HAMAMATSU |
| DERAEVE | Céline | celine.deraeve@lcc-toulouse.fr | LCC |

| | | | |
|----------------|-------------|-----------------------------------|---|
| DI BARTOLO | Jennifer | jennifer.serriere@promega.com | PROMEGA |
| DOUGUET | Dominique | douguet@ipmc.cnrs.fr | Institut de Pharmacologie Moléculaire et Cellulaire UMR 7275 |
| FABING | Isabelle | isabelle.fabing@univ-tlse3.fr | SPCMIB |
| FARCE | Amaury | amaury.farce@univ-lille.fr | INFINITE - UMR 995 |
| FEUILLU | Laurianne | laurianne.feullu2@univ-rouen.fr | COBRA - UMR 6014 |
| FIGADÈRE | Bruno | bruno.figadere@u-psud.fr | BioCIS |
| FLOCAN | Sarah | sarah.flocan@curie.fr | CMBC UMR9187 - U1196 |
| FONTANA | Angelo | afontana@icb.cnr.it | Institute of Biomolecule Chemistry Pozzuoli- ITALIE |
| GALZI | Jean-Luc | galzi@unistra.fr | BSC - UMR 7242 |
| GERBY | Bastien | bastien.gerby@inserm.fr | CRCT |
| GIZZI | Patrick | patrick.gizzi@unistra.fr | PCBIS |
| GROS | Evelyne | evelyne.gros@evotec.com | Evotec Toulouse |
| GROS | Nathalie | nathalie.gros@cemipai.cnrs.fr | CEMIPAI |
| GUILLARD-SABAS | Marianne | marianne.guillard@ensta-paris.fr | Laboratoire de Synthèse Organique ENSTA |
| GUILLEMOT | Jean-Claude | jean-claude.guillemot@univ-amu.fr | Plateforme AFMB |
| GUILLET | Valérie | valerie.guillet@ipbs.fr | IPBS |
| GUILLOU | Catherine | catherine.guillou@cnrs.fr | ICSN |
| HIBERT | Marcel | mhibert@unistra.fr | Laboratoire d'Innovation Thérapeutique |
| HORVATH | Dragos | dhorvath@unistra.fr | Laboratoire de Chémoinformatique UMR 7140 |
| IBRAHIM | Farah | farah.ibrahim@univ-tln.fr | MAPIEM |
| JACTEL | Vincent | vincent.jactel@u-paris.fr | CITCOM |
| JAHANBAKHT | Shahriar | shahriar.jahanbakht@acd labs.com | ACD/Labs |
| JOB | Aurélié | aurelie.job@uca.fr | Institut de Chimie de Clermont Ferrand |
| JOGLAR | Jesus | joglar@iqac.csic.es | IQAC-CSIC Barcelone - ESPAGNE |

| | | | |
|----------------------|-----------------|--|---|
| JOUANMIQUEOU | Bastien | bastien.jouanmiquieu@laregion.fr | Service Recherche Toulouse Direction de l'Industrie, de l'Innovation, de la Recherche et de l'Enseignement Supérieur (DIRES) |
| JULLIAN | Jean-Christophe | jean-christophe.jullian@u-psud.fr | BioCIS |
| JUNG | Marie-Louise | marielouise.jung@greenpharma.com | GreenPharma |
| KHIAR | Noureddine | khiar@iiq.csic.es | Instituto de Investigaciones Químicas – Séville- ESPAGNE |
| LABESSE | Gilles | labesse@cbs.cnrs.fr | CBS |
| LE CLECH | Mikaël | mikael.le-clech@cnrs.fr | USCBF-CN UAR 3035 |
| LE POGAM- ALLUARD | Pierre | pierre.le-pogam-alluard@universite- paris-saclay.fr | BioCIS |
| LE ROUX | Florence | florence.leroux@pasteur-lille.fr | U1177- ARIADNE - Criblage |
| LE TOULLEC | Valérie | valerie.le-toullec@cnrs.fr | USCBF-CN UAR 3035 |
| LEVEILLE | Elena | elena.levaille@unice.fr | ICN - UMR 7272 |
| LITAUDON | Marc | marc.litaudon@cnrs.fr | ICSN - UPR 2301 |
| LOUËRAT | Frédéric | frederic.louerat@crpp.cnrs.fr | Centre de Recherche Paul Pascal |
| MAHUTEAU- BETZER | Florence | florence.mahuteau@curie.fr | UMR9187 - U1196 CMBC |
| MARCOU | Gilles | g.marcou@unistra.fr | Laboratoire de Chémoinformatique UMR 7140 |
| MARTIN | Delphine | delphine.naud@curie.fr | UMR9187 - U1196 CMBC |
| MARTIN- MOTHES | Emmanuelle | emmanuelle.mothes@lcc-toulouse.fr | LCC |
| MAULAY-BAILLY | Christine | cbailly@mnhn.fr | Unité MCAM - UMR 7245 |
| MELUCCI | Manuela | manuela.melucci@isof.cnr.it | Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività Bologna - ITALIE |
| MENIEL | Blandine | blandine.seon-meniel@universite- paris-saclay.fr | BioCIS |
| MIGNOT | Florian | florian.mignot@promega.com | PROMEGA |
| MONOTUKA | Shaquil | monotukashaquil@gmail.com | Université Paris-Saclay |
| MUNIER- LEHMANN | Hélène | hmunier@pasteur.fr | INSERM - UMRS 1124 Institut Pasteur |

| | | | |
|------------------|-------------|--|---|
| NAHOUM | Virginie | virginie.nahoum@ipbs.fr | Plateforme Intégrée de Criblage de Toulouse (IPBS) |
| NGUYEN-PHAM | Khanh-Chi | khanh-chi.nguyen-pham@univ-grenoble-alpes.fr | Département de Pharmacochimie Moléculaire |
| NICOLE | Marie-Anne | manicole24@orange.fr | Université Paris-Saclay |
| PARANT | SABRINA | sabrina.aury@univ-lorraine.fr | L2CM - UMR 7053 |
| PEREZ DE VEGA | María Jesús | direccion.iqm@csic.es | CSIC - Madrid - ESPAGNE |
| PERIGAUD | Christian | christian.perigaud@cnrs.fr | Direction des Relations avec les Entreprises filière industrielle santé (DRE CNRS) IBMM - UMR 5247 |
| PEYROTTE | Suzanne | suzanne.peyrottes@umontpellier.fr | IBMM - UMR 5247 |
| PIQUE | Valerie | valerie.pique@univ-amu.fr | IMBE |
| PIVETEAU | Catherine | catherine.piveteau@univ-lille.fr | Inserm U1177 - Drugs and Molecules for Living Systems |
| PREZEAU | Laurent | laurent.prezeau@igf.cnrs.fr | Plateforme ARPEGE - IGF |
| QUEVA | Sébastien | sebastien.queva@cnrs.fr | CNRS |
| RAMOS | Pascal | pascal.ramos@ipbs.fr | IPBS |
| REMUSAT | Vincent | vincent.remusat@univ-amu.fr | ICR - UMR 7273 |
| RENAUDINEAU | Séverine | severine.renaudineau@sorbonne-universite.fr | IPCM - UMR 8232 |
| RIVIÈRE | Matthieu | matthieu.riviere@univ-nantes.fr | CEISAM - UMR 6230 |
| ROBERT | Thomas | trobert@sb-roscoff.fr | Kissf - Roscoff |
| ROBIN | Laurent | laurent.robin@univ-orleans.fr | ICOA - UMR 7311 |
| ROCHE | Philippe | philippe.roche@inserm.fr | CRCM |
| ROGNAN | Didier | rognan@unistra.fr | Laboratoire d'Innovation Thérapeutique - UMR 7200 |
| ROMERO-LABOUREUR | Eugénie | eugenie.romero@cea.fr | SCBM - CEA |
| SAUNIER | Xavier | xsauhier@beckman.com | Beckman Coulter |
| SAUREL | Olivier | olivier.saurel@ipbs.fr | IPBS |
| SIMONATO | Carine | carine.simonato@evotec.com | Evotec Toulouse |
| SPERANDIO | Olivier | olivier.sperandio@pasteur.fr | Laboratoire de Chémo-informatique et protéochimométrie - Unité de bioinformatique structurale |

| | | | |
|------------|-----------|-----------------------------------|---|
| STODEL | Marion | Marion.Stodel@evotec.com | Evotec Toulouse |
| THIBONNET | Jérôme | jerome.thibonnet@univ-tours.fr | Laboratoire Synthèse et Isolement de Molécules Bioactives (SIMBA) |
| TRAN | Kiet | kiet.tran@enscm.fr | USCBF-CN UAR 3035 |
| TRILLAT | Adeline | Adeline.Trillat@acd labs.com | ACD/Labs |
| TURCATTI | Gerardo | gerardo.turcatti@epfl.ch | Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne - SUISSE |
| TURLAIS | Fabrice | Fabrice.turlais@evotec.com | Evotec Toulouse |
| VALLIN | Aurélié | aurelie.vallin@u-picardie.fr | LG2A - UMR 7378 |
| VARNEK | Alexandre | varnek@unistra.fr | Laboratoire de Chémoïnformatique UMR 7140 |
| VAUZEILLES | Boris | boris.vauzeilles@c nrs.fr | Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN) |
| VILLA | Pascal | pvilla@unistra.fr | PCBIS - UAR 3286 |
| WACKERLIG | Judith | judith.wackerlig@univie.ac.at | Department of Pharmaceutical Sciences Vienne - AUTRICHE |
| WITEK | Elodie | elodie.witek@u-picardie.fr | LG2A - UMR 7378 |
| XHAARD | Henri | henri.xhaard@helsinki.fi | Université d'Helsinki FINLANDE |
| YILDIRIM | Pinar | pinar.yildirim@polytechnique.edu | Laboratoire de Synthèse Organique ENSTA |
| WEISWALD | Louis | lb.weiswald@baclesse.unicancer.fr | plateforme ORGAPRED |