



Atelier interactions moléculaires : Criblage de petites molécules et fragments par résonance plasmonique de surface

Emeric Gueneau, Cytiva, Saint-Germain-en-Laye, France

La résonance plasmonique de surface (SPR) est une méthode biophysique sans marquage et polyvalente utilisée par les systèmes Biacore pour cribler, sélectionner et optimiser des candidats médicaments basées sur des petits composés ou des fragments.

A travers quelques exemples, nous verrons en quoi la SPR est utile :

- Pour le criblage primaire lorsque aucun HTS n'est possible
- Pour le criblage secondaire des résultats d'HTS sélectionnés afin d'éliminer les faux positifs
- Pour améliorer la sélection et la caractérisation des hits par relations structure-activité (SAR) lors de l'approche basée sur la structure et le criblage virtuel.
- Enfin, pour l'approche basée sur les fragments (FBDD) où les composés sont petits mais également de faible affinité, ce qui nécessite des méthodes adaptées

Au-delà des données d'affinité et de cinétique, les systèmes Biacore™ combinent un débit élevé avec une qualité de données élevée : ils sont capables de cribler des milliers de molécules en utilisant uniquement quelques µg de protéines. Ils sont également utilisés pour cartographier le site de liaison à l'aide d'essais de compétition. Les systèmes Biacore™ intègrent également des outils d'évaluation des données conçus pour relever les défis actuels liés aux petites molécules et fragments, notamment l'apprentissage automatique qui réduit de plus de 90% le temps d'analyse des criblages d'interactions et d'affinité.

Suggestions de lecture:

1- [Biacore™ systems in small molecule drug discovery](#)

2- [Fragment and small molecule screening with Biacore systems](#)