



Docking Moléculaire dans le Drug Design

KRID Adel^{1,2*}

¹Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique LPMS, Département de Chimie, Université des Frères Mentouri, 25017 Constantine, Algeria.

²Centre de Recherche en Sciences Pharmaceutiques CRSP, Zone d'activité ZAM, Nouvelle Ville, Constantine, Algérie.

Code C11

Email* : a_krid@umc.edu.dz

Introduction & Objectifs :

Les méthodes *In Silico* utilisées ont pour but la caractérisation et le développement des molécules biologiquement actives vis-à-vis de leurs cibles thérapeutiques par différentes méthodes de modélisation moléculaire et/ou de l'intelligence artificielle. Ces méthodes représentent le pilier fondamental de la première phase de la recherche de nouvelles molécules médicamenteuses dans la recherche pharmaceutique. Pour cela un arsenal de plusieurs ressources informatiques est dispose que ça soit sur le plan Hardware (stations de calculs) ou sur le plan software.

Méthodologie (Matériel et méthodes):

Les principales taches se focalisent sur le docking moléculaire¹ (ou criblage virtuel) par des logiciels open source tels que Autodock Vina, Dock6.9 et différents serveurs de docking. Cette technique consiste à prédire le mode d'interaction des petites molécules (ligands) avec leurs cibles thérapeutiques d'une part et l'évaluation des énergies d'interaction d'autre part. Le criblage virtuel de chimiothèques permettra l'identification de molécules HITS. Celles-ci sont loin d'être des médicaments puisque leurs liaisons demeurent faibles avec leurs cibles appropriées. Néanmoins ces molécules HITS doivent être optimisées afin d'aboutir à des molécules LEADS. Cette optimisation se réalise par des transformations subtiles et progressives de la structure moléculaire HITS² identifiés. Ces optimisations permettront à ces nouvelles molécules de fixer de manière plus efficace à leurs cibles. Cependant, ce transfert de HIT to LEAD² reste insuffisant.

Résultats et Discussion :

Nous allons voir quels sont les piliers fondamentaux de la technique du docking moléculaire ainsi que les outils et les démarches à suivre afin de réaliser de telles simulations.

Conclusion :

La technique du docking moléculaire est une technique parmi d'autres dans le cadre d'applications des méthodes *In Silico* dans le domaine du Drug Design. C'est une technique fondamentale est indispensable dans la première phase de recherche des molécules biologiques actives.

Mots clés: *In Silico*, Docking, Drug Design, HIT, LEAD

Références bibliographiques

1. Pinzi L, Rastelli G. Molecular Docking: Shifting Paradigms in Drug Discovery. *Int J Mol Sci.* 2019 Sep 4;20(18):4331. doi: 10.3390/ijms20184331. PMID: 31487867; PMCID: PMC6769923.
2. Katsuno, K., Burrows, J., Duncan, K. *et al.* Hit and lead criteria in drug discovery for infectious diseases of the developing world. *Nat Rev Drug Discov* 14, 751–758 (2015). <https://doi.org/10.1038/nrd4683>

