

Étude *in silico* de l'effet inhibiteur de la curcumine sur la COX-2 contre le 5-fluorouracile prescrit dans le traitement anticancéreux

DJOUDEUR Chaouki^{1*}, ALEM Karima², AOUISSI Chaima²

¹ Laboratoire de Biochimie et Toxicologie Environnementale, Département de Biochimie, Faculté des Sciences, Université de Badji Mokhtar, Annaba, 23000, Annaba, Algérie.

² Laboratoire de Biochimie et Toxicologie Environnementale, Département de Biochimie, Faculté des Sciences, Université de Badji Mokhtar, Annaba, 23000, Annaba, Algérie.

Code CCP2

E-mail* : chaouki.djouder@univ-annaba.org

Introduction & Objectifs :

Le cancer présente une menace sérieuse pour la santé humaine, considéré comme la deuxième cause de décès dans le monde avec une augmentation rapide du nombre de patients atteints ces dernières années. La Cyclooxygénase 2 (Cox-2) enzyme clé produite par l'organisme en réponse à des provocations inflammatoires lors du cancer. Le 5-fluorouracile (5-FU) est l'un des agents antinéoplasiques les plus couramment utilisés en pratique clinique avec des effets indésirables altérant la chimiothérapie. Par conséquent, il est essentiel de rechercher des alternatives naturelles qui ont un potentiel anticancéreux important avec moins d'effets secondaires. Le curcuma fait partie des plantes utilisées dans l'alimentation et dans la phytothérapie, la raison pour laquelle cette plante a fait l'objet de notre travail.

Méthodologie (Matériel et méthodes) :

Nous recherchons l'effet inhibiteur de la curcumine sur la (Cox-2) contre le 5-FU via « Docking » moléculaire. Les logiciels PyRx python prescription 0.8 et BIOVIA Discovery Studio 2021 Client ont été utilisés pour concevoir le mode d'interaction de la curcumine et, cible thérapeutique impliquée dans le processus inflammatoire du cancer. L'affinité de liaisons et les scores d'amarrage ont été calculés et les meilleures conformations des ligands avec l'énergie libre de liaison la plus faible ont été sélectionnées.

Résultats et Discussion :

Les énergies de liaison obtenues au sein des complexes Cox-2/CUR et Cox-2/5-FU sont respectivement -7,00 Kcal / mol et -5,5 Kcal / mol, dont la plupart des interactions impliquées sont de nature hydrogène, hydrophobe et aromatique, or la curcumine forme un complexe plus stable avec la cyclooxygénase via l'inhibition de cette dernière et qui peut être un parfait substituant ou adjuvant du 5-FU en assurant un effet thérapeutique avec moins d'effets indésirables.

Conclusion :

Nos résultats suggèrent que la curcumine pourrait être un traitement d'appoint utile pour diminuer le développement du cancer qui menace la vie des patients cancéreux.

Mots clés : Cancer, Curcumine, 5-fluorouracile, cyclooxygénase, Docking moléculaire.

Références bibliographiques

1. Ghosh, N., Chaki, R., Mandal, V., & Mandal, S. C. (2010). COX-2 as a target for cancer chemotherapy. In *Pharmacological Reports* (Vol. 62, Issue 2, pp. 233–244). Springer Science and Business Media LLC. [https://doi.org/10.1016/s1734-1140\(10\)70262-0](https://doi.org/10.1016/s1734-1140(10)70262-0).
2. Yang, H., Huang, S., Wei, Y., Cao, S., Pi, C., Feng, T., Liang, J., Zhao, L., & Ren, G. (2017). Curcumin Enhances the Anticancer Effect Of 5-fluorouracil against Gastric Cancer through Down-Regulation of COX-2 and NF- κ B Signaling Pathways. In *Journal of Cancer* (Vol. 8, Issue 18, pp. 3697–3706). Ivyspring International Publisher. <https://doi.org/10.7150/jca.20196>.
3. Liu Z, Huang P, Law S, Tian H, Leung W and Xu C (2018). Preventive Effect of Curcumin Against Chemotherapy-Induced Side-Effects. *Front. Pharmacol.* 9:1374. [doi: 10.3389/fphar.2018.01374](https://doi.org/10.3389/fphar.2018.01374).

