

## Conception de nouveaux inhibiteurs de la kinase LRRK2 par des études 3D QSAR et docking moléculaire.

Khamouli Saida\*

\*Groupe de Chimie Computationnelle et médicinale, Laboratoire LMCE, Université Mohamed Khider – Biskra, Biskra 07000, Algérie

Code CCO 3

E-mail\* : [s.khamouli@univ-biskra.dz](mailto:s.khamouli@univ-biskra.dz)

### Résumé

La maladie de Parkinson est la deuxième maladie neurodégénérative la plus fréquente après la maladie d'Alzheimer<sup>1</sup>. Elle touche environ 6,3 millions de personnes dans le monde. Les études théoriques s'orientent actuellement vers la conception rationnelle "rational design", qui signifie que la connaissance des relations entre les propriétés physico-chimiques et la structure moléculaire des molécules connues permettent aux scientifiques de développer des nouvelles molécules. Notre objectif de travail est développement de nouveaux inhibiteurs potentiels de l'eucine -rich repeat kinase 2 (LRRK2), afin d'enrichir les classes thérapeutiques des médicaments anti-parkinson par application des méthodes de conception de médicaments telle que 3D-QSAR, le docking<sup>2</sup> moléculaire et ADMET. Les résultats de l'étude 3D-QSAR, le docking moléculaire et ADMET contribueraient grandement à l'optimisation du développement d'un nouveau médicament anti-parkinson.

### Mots clés:

Parkinson, LRRK2, 3D QSAR, Docking moléculaire, ADMET.

