

Modélisation du mode d'interaction avec le docking moléculaire de quelques dérivés polyhydroquinolines avec les cyclooxygénases.

AIMENE Nadjjet¹, ZOUCOUNE Bachir^{1,2}, KRID Adel³, HAMZA Allal¹, NEMDILI Hacene¹

¹Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale, Université de Constantine-1 (Mentouri), 25000 Constantine, Algeria.

²Laboratoire de Chimie Appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'hidi Oum el Bouaghi, 04000 Oum El Bouaghi, Algeria.

³Research Center of Pharmaceutical Sciences, Ali Mendjeli, Constantine-3, Algeria.

Code CCO 6

E-mail* : aimenenadjet@gmail.com

Résumé

Le Docking moléculaire, vise à prédire la structure d'un complexe constitué d'un ligand et d'une protéine, pour prévoir les modes d'interactions possibles pouvant mener à une valeur d'enthalpie libre de formation ΔG qui traduit l'inhibition de la cible étudiée. Les anciens formalismes de docking moléculaire, traitent la protéine ainsi que le ligand comme des corps rigides. A présent, les nouveaux codes prennent en compte la flexibilité du ligand.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à étudier – par le biais de la modélisation moléculaire (MM) les interactions entre les cyclooxygénases COX 1, COX 2 et divers ligands polyhydroquinolines (PHQs). Ces derniers peuvent avoir des intérêts biologiques et thérapeutiques vis-à-vis divers pathologies, voire l'inflammation

Pour cela nous avons procédé comme suit :

En premier lieu, nous avons optimisé nos ligands avec la mécanique moléculaire (MM) afin d'avoir un minimum énergétique.

En second lieu, nous avons appliqué la technique du docking moléculaire afin de rationaliser et modéliser le mode d'interaction des douze ligands déjà décrits avec les deux COXs d'une part et l'évaluation de l'énergie de complexes obtenus d'autre part. Pour cela nous avons utilisé le logiciel Autodock-vina qui est un logiciel d'amarrage moléculaire très répandu et connu par sa fiabilité et son pouvoir de reproduire les ligands déjà complexés et utilisé dans le criblage virtuel. Le logiciel DSViewer nous a permis la visualisation des différentes interactions.

