

## Criblage virtuel des dérivés sulfonamide en tant que inhibiteur potentiel de la protéine kinase (p38alpha), en comparaison avec le Sorafenib (Nexavar)

BELGHIT Mohamed Yazid<sup>1-2\*</sup>, HARKATI Dalal<sup>3</sup> et MOUSSI Abdelhamid<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Département Génie des procédés et pétrochimie, Faculté de la Technologie, Université Echahid Hamma Lakhdar- d'El Oued 39000, Algérie

<sup>2</sup>Laboratoire de Chimie Moléculaire et Environnement, Université de Biskra 07000, Algérie.

<sup>3</sup>Laboratoire LMCE, Faculté des Sciences Exactes et Naturelles, Université de Biskra 07000, Algérie.

<sup>4</sup>Laboratoire de Génétique, Biotechnologie et Valorisation des Bioressources (LGBVB), Université de Biskra 07000, Algérie.

Code CCP9

E-mail\* : [belghit.yazid07@gmail.com](mailto:belghit.yazid07@gmail.com)

### Introduction & Objectifs:

Le but de la découverte de médicaments est de trouver des composés chimiques qui ont un effet thérapeutique spécifique. L'une des principales techniques utilisées aujourd'hui dans la découverte de médicaments est le criblage virtuel. Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à la recherche de l'effet inhibiteur des dérivés sulfonamide à savoir: Benzyl-sulfonamide, Isopropyl-sulfonamide et Isobutyl-sulfonamide sur l'un des principale cible thérapeutique protéine kinase p38alpha (PDB ID: 3HEG).

### Méthodologie (Matériel et méthodes):

En se basent sur la méthode de l'amarrage moléculaire à laide du programme Molegro Virtual Docker (MVD) v 5.5, nous permet de calculer la fonction de notation MolDock Score. En comparaison avec le médicament co-cristallisé Sorafenib (Nexavar), celui-ci est utilisé pour le traitement des cancers du rein.

### Résultats et Discussion:

Les résultats obtenus montrent que ces dérivés présentent un intérêt thérapeutique et une capacité de désactiver la protéine kinase, en particulier le composé Benzyl-sulfonamide a révélé une importante interaction a prédite avec le site de liaison par les résidus Asp168, Glu71 et Leu74 avec un score d'énergie MolDock Score était -98.8964 kcal/mol. Cependant, la prédiction d'agissant de chaque dérivés criblés était en communs avec l'acide aminé Glu71 par des interactions hydrophobe, à l'exception du dérivé Isobutyl-sulfonamide, il s'agit de liaison d'hydrogène à une énergie est égal -2.2844 kcal/mol.

**Conclusion:** Nous avons noté que l'ensemble de ces dérivés s'est avèrent efficaces en thérapie, d'une manière significative sont d'éventuels composés bioactives en future des thérapies anticancéreuses ciblant les protéines kinases.

**Mots clés:** Docking moléculaire, dérivés sulfonamide, protéine kinase, énergie d'interaction, énergie MolDock Score.

### Références bibliographiques

1. Haridasan V. Namboodiri, et al. (2010), *Biochemistry* 49 (17), 3611-3618.
2. Malika Berredjem, Jean-Yves Winum, et al. (2004), *Synthetic Communications*, 34:9, 1653-1662.
3. Molegro ApS. (2012). Molegro Virtual Docker v5.5: DK-8000 Aarhus C, Denmark,
4. Singh, P., Islam, S.S., Ahmad, H., & Prabakaran, A. (2018). *Journal of Molecular Structure*, 1154, 39-50

