

Etude de Docking moléculaire du complexe P-phénylènediammonium di (hydrogen sulfate) (PPDHS)

OUANNASSI Fattouma^{1*}, FADILA Berrah^{1,2}, FOUZIA Boursas³

¹Laboratoire de Chimie Appliquée et Technologie des Matériaux LCATM, Université Larbi Ben M'Hidi, 04000, Oum El Bouaghi, Algeria.

²Département Sciences de la Matière, Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie, Université Oum El Bouaghi, Algeria.

³Laboratoire de Chimie Physique LCP, Université 08 Mai 45 Guelma 24000, Algeria

Code CCP7

E-mail* : fattoumaouannassi@gmail.com

Introduction & Objectifs :

Dans le cadre de la recherche sur la découverte de médicaments, l'identification et la validation de nouveaux composés, ainsi que l'identification de sites de liaison actifs de cibles biologiques contre certains composés par des expériences en laboratoire sont très coûteux et chronophages. Actuellement, cela peut se faire à l'aide d'outils de calcul bioinformatique . tell que l'amarrage moléculaire(le docking moléculaire).

Le docking moléculaire peut être défini comme la prédiction de la structure des complexes du ligand-récepteur, où le récepteur est habituellement une protéine ou un oligomère de protéine et le ligand est soit une petite molécule ou une autre protéine [1].

La P-phénylènediamine et ses dérivés ont des activités biologiques intéressantes. Grâce à leurs propriétés , On fait état d'un nouveau composé hybride le P-phénylènediammonium di (hydrogen sulfate) (PPDHS), il présente l'avantage de combiner les caractéristiques des matières organiques avec celles des matières inorganiques.

Nous avons utilisé le docking moléculaire pour explorer les aspects théoriques pour le potentiel antiviral possible du PPDHS , les résultats théoriques révèlent qui a une activité inhibitrice élevée.

Méthodologie (Matériel et méthodes):

Le SARS-CoV-2 est un nouveau coronavirus identifié comme la cause de la maladie à coronavirus de 2019 (COVID-19) qui a débuté à Wuhan, en Chine à la fin de 2019 et s'est propagé dans le monde entier.

Nous avons appliqué le docking moléculaire où nous avons docké le PPDHS contre la protéine M^{Pro} du SARS-CoV-2 utilisant AutoDock Tools et AutoDock4 [2-3].

Résultats et Discussion :

Protein	compound	RMSD ^b (Closter)	Bindingenergie (Kcal/Mol)	Inhibition constant ^d (μ mol)	H -band	Amino acid involved in interaction
7BQY	PPDHS	0.0	-12.40	819.99	HIS163...O ASN119...O3 LEU4...H3N ASN142...H4N	1.958 Å 2.009 Å 2.079 Å 2.107 Å ASN142-LEU27- HIS163- THR26- GLY143-SER144- ASN119-LEU4- CYS145

Tab.1.Les valeurs de docking moléculaire de PPDHS avec 7BQY.



Notre composé a montré des affinités de liaison plus élevées avec une énergie de liaison de -12,40 kcal/mol.

La visualisation des interactions intermoléculaires entre la PPDHS et la protéine M^{pro} a montré qu'elle forme 4 liaisons hydrogène accompagnées d'interactions hydrophobes importantes **Fig.1. et Fig.2.** .

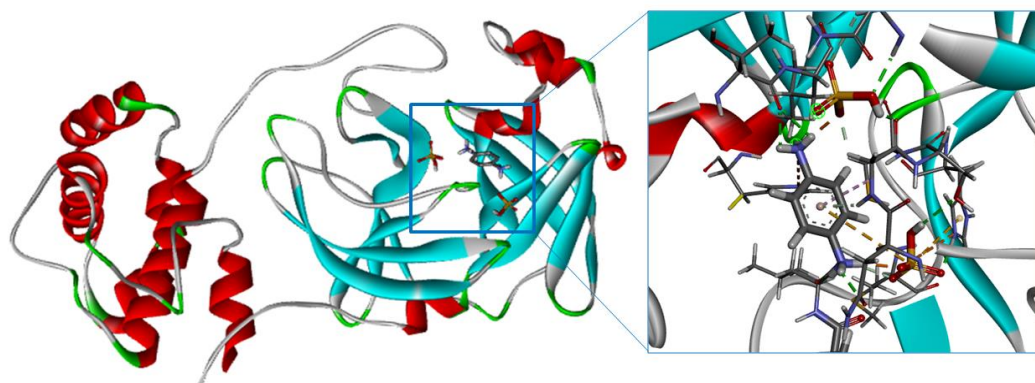


Fig.1. La pose convenable de docking du PPDHS avec SARS-CoV-2 M^{pro}(7BQY).

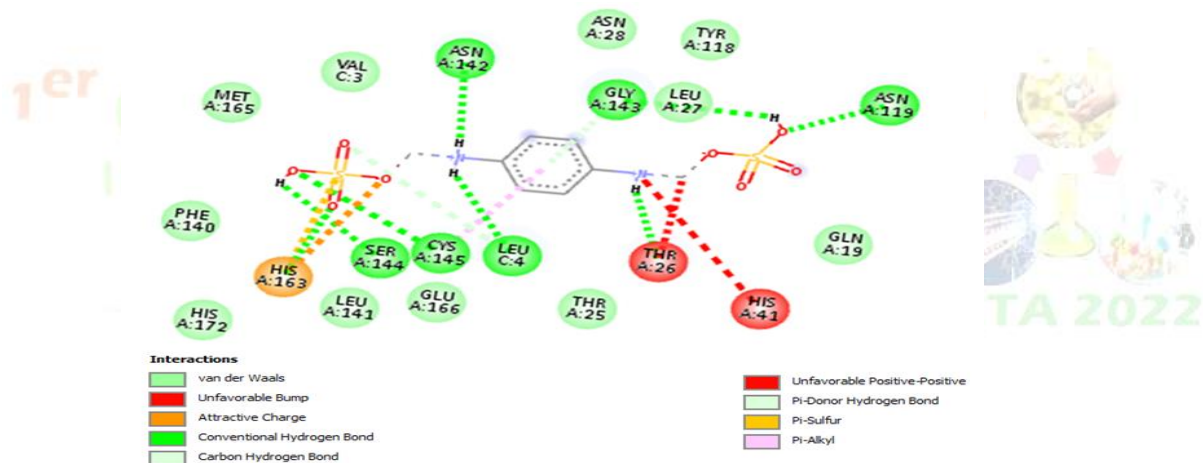


Fig.2. La représentation 2D des interactions PPDHS avec SARS-CoV-2 M^{pro}(7BQY).

Conclusion :

Les résultats de Docking prouvent que le PPDHS pourrait donc être utilisé comme un inhibiteur possible du SRAS-CoV-2 après une intervention in vitro appropriée et la validation in vivo ainsi que les essais cliniques.

Mots clés: PPDHS, COVID-19, SARS-CoV-2, M^{pro}, AutoDock 4, docking moléculaire.

Références bibliographiques

- Inbal, H., Buyong, M., Haim, W., Ruth, N. (2002), *Structure, Function, and Genetics* 47:409–443.
- Jawaria, M., Khan, M. U., Hussain, M., Muhammad, S. (2022), *Journal of the Iranian Chemical Society* 19:839–846.
- Ren, Z., Yan, L., Zhang, N., Guo, Y., Yang, C., Lou, Z., Rao, Z. (2013), *ProteinCell* 4:248.

