



A08 : Docking Moléculaire et traitement anti-hormonal du cancer du sein

Titre

Français : Docking Moléculaire et traitement anti-hormonal du cancer du sein

Anglais : Molecular docking and anti-hormonal treatment for breast cancer

Auteurs

CHAHINAIZE ZAOUI (1), AMAL FEDOL (2), AMAL SOULEF SAADI (3), FAIZA BERIKSSI (3), FATMA HAIBA (2), TOUFIK SAHRAOUI (3)

(1) Laboratoire de biologie du développement et de la différenciation , University d'Oran 1, IAP ES Senia, 31000, Oran, Algérie

(2) Faculté de Médecine, Université d'Oran 1, IAP ES Senia, 31000, Oran, Algérie

(3) Laboratoire de biologie du développement et de la différenciation , Université d'Oran 1, IAP ES Senia, 31000, Oran, Algérie

Responsable de la présentation

Nom : zaoui

Prénom : chahinaize

Adresse professionnelle : cité gendarque batimon 2 n°é

Code postal : 31000

Ville : Oran

Pays : Algérie

Newsletter : 1

Mots clés

Français : Docking moléculaire, Tamoxifène, anti-aromatases, tumeur luminale.

Anglais : molecular docking, Tamoxifene, Anti-aromatases, luminal tumor

Spécialité

Principale : Biologie

Secondaire : Autres

Texte

Le traitement systémique du cancer du sein comprend, la chimiothérapie, le traitement anti-hormonal et l'immuno- thérapie. plusieurs traitement anti- hormonal systémiques sont proposé. leurs actions dépendent de leurs récepteurs [1,2,3]. Dans notre étude nous avons opté pour un docking moléculaire de trois types de molécules et leurs analogues structuraux (Anti Œstrogène, anti-aromatases et anti-androgènes). Les logiciels utilisés sont UCSH chimera, AutoDock Vina, les bases de données; PDB et PUBChem. Nous avons calculé les scores (kcal/mol et les RMSD (Å)).

Pour les anti-Oestrogène : Tamoxifène (-7.1 kcal/mol, 0.751 Å), Endoxifène (-7.7 kcal/mol, 0.371 Å), Tormifène (-7.0 kcal/mol, 1.133 Å), Raloxifène (-8.7 kcal/mol, 1.102 Å). Pour les anti-aromatases : Letrozol (-6.4 kcal/mol, 1.355 Å), AnastrozoL (-5.9 kcal/mol, 1.635 Å) . Pour anti-androgènes : Bicalutamide (-6.8 kcal/mol), Flutamide (-7.2 kcal/mol, 2.277 Å), Nilutamide (-6.8 kcal/mol, 1.877 Å).

la prescription de ces molécules dépend du phénotype moléculaire de la tumeur et du statut hormonal de la patiente. Dans notre étude nous avons tenté in silico de comparer entre les différentes molécules et leurs analogues structuraux en vue de sélectionner les plus efficace selon les cas en vue d'un traitement personnalisé.

référence bibliographique:

01- Haute autorité de santé et institut national du cancer, Tumeur maligne, affection maligne du tissu lymphatique ou hématopoïétique, cancer du sein, 2010.

02- M. DOWSETT, J. CUZICK, J. Ingle, Meta analysis of breast cancer outcomes in adjuvant trials of aromatases inhibitors versus tamoxifene, J Clin Oncol , 28, 2010, p509-518.

03- R, MERTELSMANN, M. ENGELHARDT, DP. BERGER, Précis d'hématologie et d'oncologie, springer-Verlag France, Paris, 2011, P 162-169.