



A19 : cancer du sein apocrine: étude in silico de la relation structure - activité des récepteurs androgéniques et casodex.

Titre

Français : cancer du sein apocrine: étude in silico de la relation structure - activité des récepteurs androgéniques et casodex.

Anglais : apocrine breast cancer: in silico study of the structure - activity relationship of androgen receptor

Auteurs

C ZAOUÏ (1), A FEDOL (2), I MAHI (2), S LAZEB (2), S GHERDAOUI (3), K TERKI (4), M YOUSFI (5)

(1) LBDD, UNIV ORAN1, SENIA ORAN, 31000, ORAN, ALGERIE

(2) , UNIV ORAN1, SENIA ORAN, 31000, ORAN, ALGERIE

(3) , USTO MB, BIR EL DJIR, 31000, ORAN, ALGERIE

(4) , FACULTÉ DE MÉDECINE UNIV ORAN1, SENIA ORAN, 31000, ORAN, ALGERIE

(5) UROLOGIE EHU, FACULTÉ DE MÉDECINE UNIV ORAN1, SENIA ORAN, 31000, ORAN, ALGERIE

Responsable de la présentation

Nom : ZAOUÏ

Prénom : CHAHINAÏZE

Adresse professionnelle : FACULTÉ DE MÉDECINE UNIV ORAN1 SENIA

Code postal : 31000

Ville : ORAN

Pays : ALGERIE

Newsletter :

Mots clés

Français : tumeur apocrine, récepteur androgénique, docking moléculaire, casodex

Anglais : apocrine tumor, androgen receptor, molecular docking, casodex

Spécialité

Principale : Biologie

Secondaire : Autres

Texte

Le cancer du sein est très hétérogène par sa structure et son évolution. Les tumeurs triples négatives contiennent une sous-classe de tumeurs apocrines exprimant les récepteurs androgéniques.

Le casodex est une molécule utilisée en hormonothérapie pour bloquer le récepteur androgénique [1].

L'objectif de ce travail est de faire une simulation de docking moléculaire entre des récepteurs androgéniques et le casodex.

Le docking moléculaire est une étude in silico qui fait appel au processus d'amarrage moléculaire, méthode qui calcule l'orientation préférée d'une molécule vers une seconde lorsqu'elles sont liées pour former un complexe stable.

Nous avons fait appel aux logiciels suivants: UCSF Chimera (principale interface de modélisation), AutoDock Vina (module de calcul et de docking) et aux bases de données suivantes PDB (Protein Data Bank) et PubChem.

Nous avons retrouvé sept torsions actives, dont quatre torsions proposent un site de liaison active possible entre RA et le Bicalumide.

Ces résultats sont le premier pas vers une restriction moléculaire de la tête de série des anti-androgènes car ils permettront de proposer des structures dérivées capables d'offrir un meilleur blocage androgénique ou peut-être dans certains cas offrir moins de fixation (blocage androgénique partiel).

1: Masiello D., Cheng S., Bubly G. J., Lu M. L. & Balk S. P. Bicalutamide functions as an androgen receptor antagonist by assembly of a transcriptionally inactive receptor. J. Biol. Chem. 277, 26321-26326 (2002).