

## A05 : CANCEROLOGIE MAMMAIRE : Docking moléculaire et Traitement antihormonal

### Titre

**Français :** CANCEROLOGIE MAMMAIRE : Docking moléculaire et Traitement antihormonal

**Anglais :** BREAST CANCEROLOGY: Molecular docking and anti-hormonal treatment

### Auteurs

C ZAOUÏ (1), A FEDOL (2), D. EL. BOUCHERIT (3), K. TADJ (3), EL. BOUCHERIT (3), F. BEREKSI (4), T. SAHRAOUI (5)

(1) (1) Laboratoire de Biologie du Développement et de la Différenciation (LBDD) (2) Département de pharmacie, Faculté de médecine univ. , univ. D'ORAN 1., Université Oran 1 es-senia , 31000, ORAN , Algérie

(2) Département de pharmacie, Faculté de médecine univ. D'ORAN 1. , Université Oran1 , université Oran1 , 31000, Oran, Algérie

(3) (1) Laboratoire de Biologie du Développement et de la Différenciation (LBDD)Univ ORAN1. (3) Service de gynécologie- obstétrique EHUO , Université Oran1 , Université Oran 1 es-senia , 31000, Oran, Algérie

(4) (1) Laboratoire de Biologie du Développement et de la Différenciation (LBDD)Univ ORAN1. (4) Service d'oncologie Médicale, EHUO. , Université Oran1 , université, 31000, Oran, Algérie

(5) (1) Laboratoire de Biologie du Développement et de la Différenciation (LBDD)Univ ORAN1. , Université Oran1 , université, 31000, Oran, Algérie

### Responsable de la présentation

**Nom :** ZAOUÏ

**Prénom :** CHAHINAÏZE

**Adresse professionnelle :** dépt. de pharmacie, Fac. de Médecine ; univ ORAN1

**Code postal :** 31000

**Ville :** ORAN

**Pays :** Algérie

**Newsletter :** 1

**Inscription PJS :** 1

### Mots clés

**Français :** cancer du sein , anti-aromatases, anti-androgène , doking moléculaire

**Anglais :** breast cancer, anti-aromatases, anti-androgen, molecular doking.

### Spécialité

**Principale :** Biologie

### Texte

Contexte :

Le traitement systémique des cancers comprend, la chimiothérapie[1] , le traitement anti-hormonal et l'immuno-thérapie. Ces thérapies peuvent être prescrites seules ou associées. Plusieurs traitements anti- hormonaux systémiques sont proposés pour la prise en charge du cancers du sein . L'action de ces molécules dépend de la sur-expression de leurs récepteurs au niveau des composantes infiltrantes et du statut hormonale des patientes[2,3] . :

Objectifs :

comparer les affinités des analogues avec leurs récepteurs.

Matériel et méthodes :

Dans notre étude nous avons opté pour un docking moléculaire de trois types de molécules, utilisées dans la prise en charge du cancer du sein, 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)).

Résultats :

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).

#### Discussion :

Raloxifène a une meilleure affinité avec les récepteurs oestrogéniques que ses autres analogues.

Letrozol a une affinité meilleure que l'anastrazol avec les aromatasés. L'affinité de Flutamide avec les récepteurs androgéniques est supérieure à ses analogues étudiés

#### Conclusion

La prescription de ses molécules dépend du phénotype moléculaire de la tumeur et du statut hormonal des patientes. Dans notre étude nous avons tenté *in silico* de comparer entre les différentes molécules utilisées dans le cancer du sein et leurs analogues structuraux en vue de sélectionner les plus efficaces selon les cas en vue d'un traitement personnalisé.

#### Références bibliographiques:

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.