

BIN-O3

Utilisation du docking moléculaire dans la recherche de nouveaux agents antidiabétiques

Amina Merzoug^{1,2}, Hanane Boucherit^{1,2}, Abdelouahab Chikhi¹, Abderrahmane Bensegueni¹

¹Laboratoire de Biochimie Appliquée, Département de Biochimie et Biologie Cellulaire et Moléculaire, Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université des Frères Mentouri, Constantine 1, Algérie.

²Centre Universitaire Abdelhafid Boussouf, Mila, Algérie.

a.merzoug@centre-univ-mila.dz

Résumé

Le diabète de type 2 constitue aujourd'hui une préoccupation majeure en termes de santé publique. L'objectif principal de ce travail est d'identifier *in silico* par la méthode de docking moléculaire de nouvelles molécules inhibitrices potentiels de l'alpha glucosidase qui a un rôle important dans le traitement du diabète type 2. Cette enzyme sert à dégrader les polysaccharides alimentaires qui aident l'organisme à réduire l'impact des glucides alimentaires sur la glycémie

Un criblage virtuel par docking moléculaire a été réalisé sur une collection de similaires de composé WA7 provenant de la banque de données PubChem. Ce criblage nous a permis de proposer un composé, le (2R,3R,4S,5S)-6-(2,4-dinitroanilino)hexane-1,2,3,4,5pento (CID_92236433), comme inhibiteur de l'alpha glucosidase plus puissant que l'inhibiteur de référence. Les résultats du docking montrent que le composé proposé peut pénétrer dans le site actif de l'alpha glucosidase, pour former des interactions avec les acides aminés clés de cette enzyme. Une évaluation positive des propriétés pharmacologiques par le serveur Suisse ADME et Pre ADMET nous donne de bonnes perspectives pour ce composé en tant que nouvel inhibiteur de l'alpha glucosidase. Il conviendrait dans le prolongement de cette étude de tester l'activité biologique de cet inhibiteur nouvellement proposé par une étude expérimentale pour confirmer les résultats obtenus.

Mots-clés : Alpha glucosidase, Diabète de type 2, Docking moléculaire.