



BIN-A8

Étude comparative du potentiel anti-inflammatoire de la curcumine contre le tofacitinib par docking moléculaire

Djouder Chaouki, Alem Karima

*Laboratoire de Biochimie et Toxicologie Environnementale, Département de Biochimie, Faculté des Sciences,
Université de Badji Mokhtar, Annaba, 23000, Annaba, Algérie.*

chaouki.djouder@univ-annaba.org ; chaouki.djouder@gmail.com

Résumé

Les maladies auto-immunes et inflammatoires présentent un challenge pour les spécialistes de la santé, et qui reste un besoin médical non satisfait. Parmi les approches thérapeutiques pour faire face à ces affections consiste à cibler l'activité des tyrosines kinases qui régulent la production de médiateurs inflammatoires, en impliquant la voie de signalisation intracellulaire JAK/STAT (Janus kinases/Signal Transducers and Activators of Transcription). Les inhibiteurs de kinases ont le potentiel d'une efficacité, d'une commodité et d'une pénétration tissulaire étendues, leurs conceptions avec une sélectivité ciblée peut être difficile. Le tofacitinib est un médicament destiné au traitement de la polyarthrite rhumatoïde, inhibe les januskinases en particulièrement JAK1 et JAK3. Le curcuma fait partie des plantes utilisées dans l'alimentation et dans la phytothérapie avec moins d'effets secondaires, la raison pour laquelle cette plante a fait l'objet de notre travail. Nous nous intéressons à déterminer l'effet inhibiteur de la curcumine "principe actif du curcuma" sur JAK1 contre le tofacitinib par docking moléculaire. Les logiciels AutoDock Vina 1.1.2 et LigPlus 2.2.5 sont utilisés pour étudier les liaisons covalentes et d'analyser les résultats respectivement. Premièrement les meilleures poses des ligands (curcumine, tofacitinib) ont été évaluées puis les conformations optimales de ces derniers ont été sélectionnées en se basant sur leurs énergies libres de liaison les plus faibles. Les résultats ont montré que la curcumine (8,5 kcal/mol) est plus puissante en tant qu'inhibiteur par rapport au tofacitinib (7,9 kcal/mol). En conséquence la curcumine pourrait être un traitement alternatif pour les maladies inflammatoires.

Mots-clés : Phytothérapie, Docking moléculaire, JAK1, Curcumine, Tofacitinib.