

Du 06 au 08  
Novembre 2019

PALAIS DU PHARO,  
MARSEILLE

Les cancers du sein de demain :  
le "big bang" ? *Prévention, Dépistage, Traitements  
et Évolutions sociétales*

41<sup>ES</sup> JOURNÉES DE LA SOCIÉTÉ  
FRANÇAISE DE SÉNÉLOGIE ET DE  
PATHOLOGIE MAMMAIRE

Organisateurs : Brigitte Séradour, Pascal Bonnier, Catherine Noguès et Anthony Gonçalves



**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 apoclines 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 peuvent être dans certains cas offrir moins de fixation (blocage androgénique partiel).

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