



# Calculs et modélisation des interactions entre trois pesticides et une enzyme la glutathion s-transférase à l'aide de techniques de « Docking » moléculaire



Sebti Lemya <sup>(1)</sup>

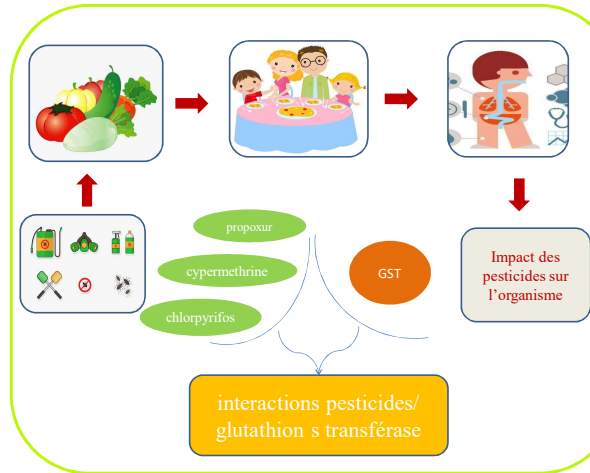
(1) Laboratoire de Biotechnologie, Environnement et Santé, université de Jijel – Algérie.  
[sebti.lemya@gmail.com](mailto:sebti.lemya@gmail.com)

## Introduction

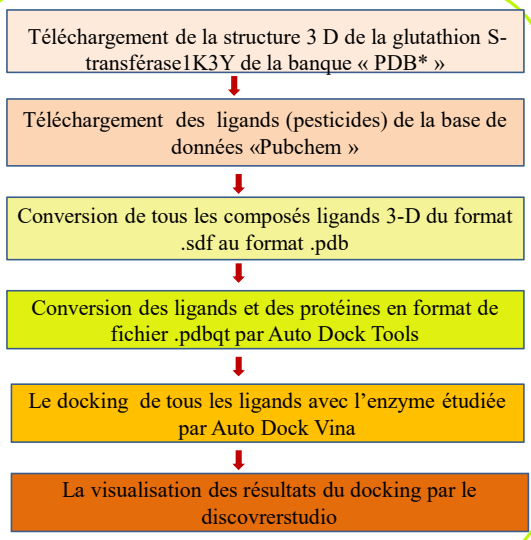
Avec le développement des outils informatiques, la modélisation moléculaire, plus précisément le docking moléculaire s'est très vite introduit dans le domaine de la recherche en biologie permettant ainsi le traitement du flot des données produites et l'optimisation de ses avancées. L'étude des interactions des pesticides au sein d'un mélange avec différentes cibles aux niveaux cellulaire et moléculaire est une problématique très complexe. Il est difficile de prévoir les interactions des substances chimiques dans les mélanges et de connaître leurs modes d'action possibles, notamment leurs effets à long terme.

L'objectif principal de notre travail est de modéliser les interactions entre trois pesticides : le chlorpyrifos, le propoxur et la cyperméthrine et une enzyme ; la glutathion s-transférase (GST).

Pour ce faire, nous avons appliqué la technique du docking moléculaire afin de rationaliser et modéliser le mode d'interaction entre les pesticides et l'enzyme étudiée. Une évaluation de leurs énergies d'interactions (scoring) a aussi été réalisée. Nous avons utilisé le logiciel Autodock Vina qui est un logiciel d'amarrage moléculaire et de criblage virtuel très répandu et connu pour sa fiabilité et son pouvoir de reproduire les ligands déjà complexés. Facile d'utilisation et d'une grande précision il offre des performances élevées.



## Matériel et méthodes



## Résultats

The results section displays three panels, each showing a different pesticide docked into the active site of GST. Each panel includes a 3D surface representation of the enzyme with the ligand highlighted, and a corresponding 2D ball-and-stick model showing the interaction mode.
 

- Propoxur:** Représentation du positionnement du propoxur dans le site actif de la glutathion-s-transférase. Mode d'interaction du propoxur avec le site actif de la glutathion-s-transférase.
- Chlorpyrifos:** Représentation du positionnement du chlorpyrifos dans le site actif de la glutathion-s-transférase. Mode d'interaction du chlorpyrifos avec le site actif de la glutathion-s-transférase.
- Cyperméthrine:** Représentation du positionnement de la cyperméthrine dans le site actif de la glutathion-s-transférase. Mode d'interaction de la cyperméthrine avec le site actif de la glutathion-s-transférase.

## Résultats

Ligands	$\Delta G$ score (KJ/mol)
chlorpyrifos	- 6.8
cyperméthrine	- 10.3
propoxur	- 6.8

Scores de l'interaction entre les trois pesticides (chlorpyrifos, cyperméthrine et propoxur) et la GST.

Le complexe glutathion s-transférase-cyperméthrine a donné l'énergie la plus faible ce qui indique une grande affinité entre la GST et ce pesticide.

## Discussion

La technique du docking moléculaire nous a permis de prédire le mode d'inclusion et le mode d'interaction de chacun des pesticides étudiés avec la glutathion s-transférase d'une part et l'évaluation de leurs énergies d'interactions (scoring) et la détermination des interactions possibles d'autre part.

La modélisation de l'énergie d'interaction entre le chlorpyrifos, le propoxur et la cyperméthrine et le site actif de la glutathion s-transférase a donné lieu à un score de l'ordre de -6.8 Kcal/mol, -6.8Kcal/mol et -10.3 Kcal/mol respectivement. En analysant les différents complexes obtenus suite à notre étude *in silico*, nous avons pu conclure que les principales interactions entre les pesticides et les sites actifs de l'enzyme étudiée sont de type interactions hydrophobiques. Les liaisons hydrogènes, les interactions de type électrostatiques, les interactions halogènes et les liaisons carbone-hydrogène sont aussi parmi les principales interactions entre les ligands et les récepteurs étudiés.

## Conclusion

La modélisation moléculaire est une alternative pour la prédiction des interactions protéiques. Elle permet d'obtenir des informations sur les modes d'interactions des protéines sur le plan structural. Notre travail avait pour but essentiel de démontrer l'intérêt de la modélisation moléculaire dans l'étude des interactions entre la glutathion s-transférase et trois pesticides : le propoxur, le chlorpyrifos et la cyperméthrine.

Les résultats ont montré que les trois pesticides ont une grande affinité pour la GST et les trois complexes formés sont stabilisés par un nombre important de différents types de liaisons.

Néanmoins après l'analyse des résultats on suppose que seul le pesticide cyperméthrine peut être conjugué au glutathion et peut ainsi être éliminé de l'organisme.

\* PDB : Protein Data Bank La banque de données sur les protéines du Research Collaboratory for Structural Bioinformatics.