



EXTRACTION DE L'HUILE ESSENTIELLE DE LA SAUGE OFFICINALE (SALVIA OFFICINALIS) ET L'INHIBITION DE LA DPP4 PAR SON COMPOSÉ MAJORITAIRE

AYACHI Hicham^{1,2*}, BENDIABDALLAH Amal²

¹Université BELHADJ BOUCHAIB Ain-Témouchent, Algérie

²Laboratoire des substances naturelles et bioactive « LASNABIO » - Université ABOU BEKR BELKAID Tlemcen, Algérie

INTRODUCTION

La plupart des médicaments actuels ont pour cible des enzymes. Cette approche théorique permet de prédire le mode d'interaction d'un ligand avec son récepteur. L'introduction de groupes volumineux provoque un réarrangement conformationnel dans la poche de site actif qui sera probablement renforcé par la complémentarité et donc l'activité.

MATÉRIELS ET MÉTHODES

L'extraction de l'huile essentielle de la sauge officinale a révélé la présence d'un produit majoritaire l'alpha-béta thujone[1].

L'huile essentielle a été extraite par hydrodistillation dans un appareil de type "Clevenger", l'étude de l'inhibition de son composé majoritaire a été réalisée par la méthode du docking moléculaire (amarrage moléculaire)[2,3].

RÉSULTATS ET DISCUSSION

L'extraction de l'huile essentielle de la sauge officinale a donné un rendement de 1,8 %. Les résultats obtenus dans ce travail par docking moléculaire a permis de vérifier et de compléter les données expérimentales de l'inhibition de la DPP4 [4]. Le complexe ligand- récepteur se forme, celui-ci va s'adapter à la conformation la plus stable, c'est-à-dire avec le niveau énergétique le plus faible.

L'introduction des groupes volumineux provoque un réarrangement conformationnel dans la poche du site actif qui sera probablement renforcé par la complémentarité et donc l'activité.

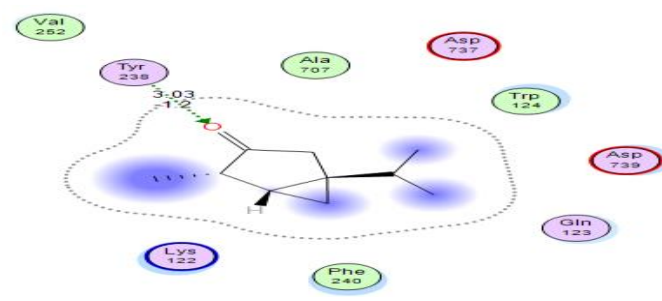
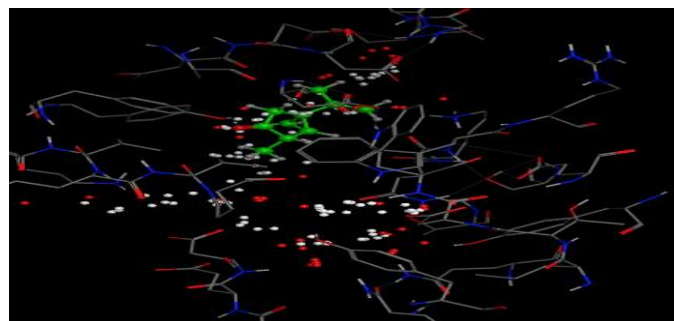


Diagramme d'interaction (DPP4+ Alpha-béta-Thujone)

CONCLUSION

les résultats ont montré que des interactions avec les résidus de l'enzyme ont été formé, on peut dire qu'il y a une affinité entre l'inhibiteur et l'enzyme.

Les résultats montrent que l'inhibiteur alpha-béta thujone présente une meilleure inhibition de la DPP4.

La plus faible énergie d'interaction correspond à la géométrie la plus stable et par conséquent, l'alpha-béta thujone peut probablement être considéré parmi les meilleurs inhibiteurs pour le traitement du diabète de type 2.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] F.P Miller, A.F Vandome, J.M Brewster, Dipeptidyl Peptidase-4: Cluster of Differentiation, Protein, Gene, Development of Dipeptidyl Peptidase-4, Broché, P80; 2010.
- [1] National Institutes of Health , Public Health Service, U.S. DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES, (CAS NO. 76231-76-0), NTP TECHNICAL REPORT ON THE TOXICOLOGY AND CARCINOGENESIS "STUDIES OF α,β -THUJONE" , November 2011; NIH Publication No. 12-5912
- [3] Molecular Operating Environment (MOE) Chemical Computing Group, Montreal, Quebec, Canada10, 2012.
- [4] H. J. Böhm, M. Stahl. Rapid empirical scoring functions in virtual screening applications, *J.Med. Chem Res* 9,P445-462.1999.