Molécules virtuelles

Autor(en): **Gordon, Élisabeth**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Horizons : le magazine suisse de la recherche scientifique**

Band (Jahr): **21 (2009)**

Heft 81

PDF erstellt am: **26.05.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-970992

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.
Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.
Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Ein Dienst der *ETH-Bibliothek*
ETH Zürich, Rämistrasse 101, 8092 Zürich, Schweiz, www.library.ethz.ch

http://www.e-periodica.ch

Molécules virtuelles

Une équipe de chimistes de l'Université de Berne a créé une banque de données renfermant quelque 960 millions de molécules ! Son objectif est de trouver de nouveaux médicaments qui pourraient figurer, un jour, dans la pharmacopée.

PAR ÉLISABETH GORDON

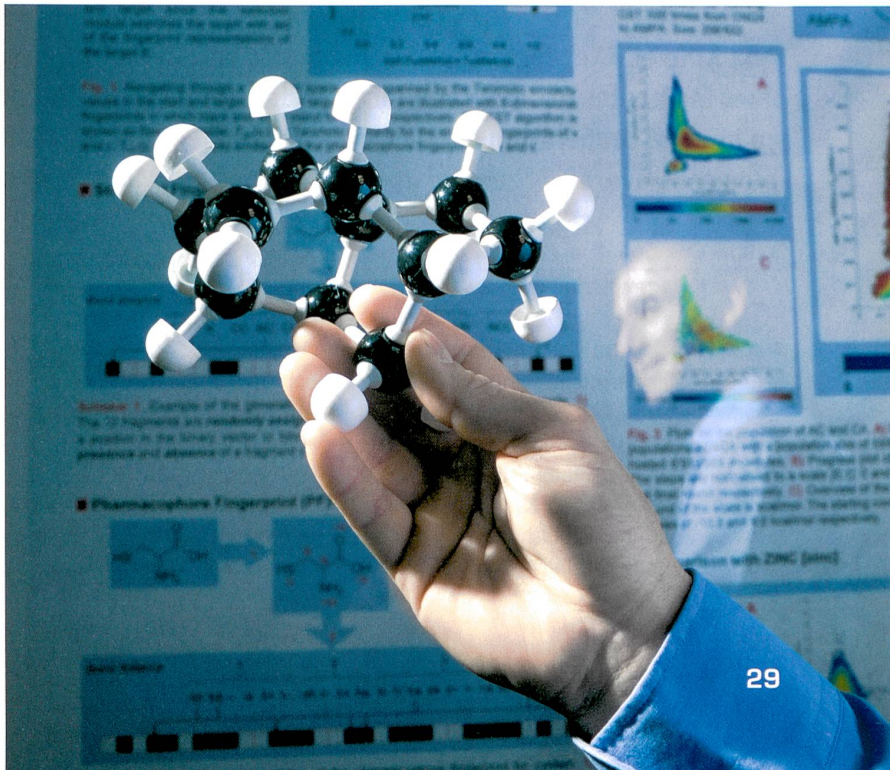
Elaborer de nouveaux médicaments pour lutter contre des maladies encore incurables ou pour améliorer les traitements existants : tel est l'objectif que poursuit l'industrie pharmaceutique. C'est aussi le but que s'est fixé l'équipe de Jean-Louis Reymond, au département de chimie et de biochimie de l'Université de Berne. Son travail s'inscrit toutefois très en amont de ce long processus.

Pour trouver de nouveaux produits thérapeutiques, il a longtemps été d'usage de partir d'une substance naturelle dont on connaissait les effets bénéfiques, de l'analyser pour en déterminer le principe actif, puis de synthétiser celui-ci en laboratoire. Jean-Louis Reymond et ses collègues ont adopté une démarche inverse. Ils sont partis des molécules, ces « briques chimiques » qui sont à la base de tout médicament, puis ont cherché, parmi elles, celles qui pourraient avoir une activité pharmacologique intéressante.

« Nous avons voulu faire une liste exhaustive de toutes les molécules possibles », explique le professeur de chimie. Ordinateurs très rapides à l'appui, les chercheurs ont donc construit une sorte de jeu de Lego et ont combiné, de toutes les façons imaginables, les principaux atomes qui forment le squelette des molécules organiques (carbone, azote, oxygène et fluor). Leur seule contrainte était de respecter les lois fondamentales de la chimie et de la pharmacologie. Il y a deux ans, ils ont ainsi généré une banque de données de plus de 26 millions de petites molécules constituées, au maximum, de onze atomes. Puis ils ont poursuivi avec des molécules ayant jusqu'à treize atomes et ils en ont obtenu environ 960 millions ! « C'est la limite supérieure de ce que l'on peut faire avec les moyens informatiques actuels », note Jean-Louis Reymond. Un résultat qui est toutefois impressionnant. Cette banque de données a d'ailleurs déjà été mise à la disposition des laboratoires académiques et elle a suscité l'intérêt de plusieurs entreprises pharmaceutiques.

Les chercheurs bernois ne se sont pas arrêtés en si bon chemin. Ils ont commencé à exploiter leur collection pour tenter de repérer les molécules qui pourraient avoir un intérêt pharmacologique, en procédant à un « criblage virtuel ». Pratiquement, il s'agit de confronter, toujours à l'aide de programmes informatiques, ces différentes structures chimiques aux molécules du vivant, les protéines, afin de voir si les unes et les autres peuvent s'emboîter et interagir. « Sur l'ensemble des molécules de la base de données, 20 à 30 pour cent sont potentiellement intéressantes », souligne le professeur Reymond. Ce sont elles qui seront fabriquées en laboratoire.

A quoi pourraient-elles servir ? En priorité aux traitements de troubles du système nerveux qui font généralement appel à des molécules de petite taille. En collaboration avec des collègues médecins à Berne et à Genève, les chimistes se sont donc intéressés à des molécules susceptibles d'interagir avec des neurotransmetteurs qui jouent un rôle important dans des maladies neurologiques, comme le glutamate et l'acétylcholine. Dans ce dernier cas, il existe déjà des médicaments qui bloquent le récepteur de l'acétylcholine. « Nous nous en sommes inspirés et nous en avons cherché des analogues virtuels qui pourraient être synthétisés beaucoup plus simplement. Nous en avons déjà trouvé 700 000 », relève le chimiste. De ces substances virtuelles à des médicaments éventuellement commercialisables, il y a encore un très long chemin à parcourir. Mais par leur travail très fondamental, les chercheurs visaient surtout à élaborer « une approche radicalement nouvelle pour trouver des substances innovantes. Et cela marche », conclut le scientifique. ■



Severin Nowacki

L'une des molécules créées par Jean-Louis Reymond grâce à l'informatique.