

---

# Etude DFT de l'interaction Taxol-Ca<sup>2+</sup>

Meziane Brahimi\*<sup>†1</sup> and Soraya Abtouche<sup>‡2</sup>

<sup>1</sup>Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene [Alger] (USTHB) – BP 32 EL ALIA  
16111 BAB EZZOUAR ALGER, Algérie

<sup>2</sup>Université des sciences et de la technologie Houari-Boumediene [Alger] – BP 32 EL ALIA 16111 BAB  
EZZOUAR ALGER, Algérie

## Résumé

Il est connu que l'excès d'ion métalliques comme le fer et le calcium favorise la prolifération des cellules cancéreuses [1]. Il serait important d'explorer théoriquement l'interaction drug-Metal, dans le cas des anticancéreux. Le Paclitaxel (Taxol) est un inhibiteur mitotique utilisé en chimiothérapie du cancer du sein, de l'ovaire, de la vessie et de la prostate. Le Taxol est l'un des produits anticancéreux le plus vendu au monde [2,3]. Le but de cette étude est d'examiner la chélation des ions métalliques avec le taxol. Dans un premier temps, on s'est intéressé à la partie active du Taxol, à savoir la chaîne Latérale (CL) [4]. Des calculs préliminaires semi empirique (PM6) et DFT ont été réalisés avec Gaussion03. La fonctionnelle d'échange et de corrélation retenue pour ce travail est B3LYP avec la base 6-31+G(d). Les sites de chélation sont multiples dans le cas du complexe (CL-Ca)<sup>2+</sup>. Du point de vue théorie des OM frontières, l'insertion du calcium ionique conduit à transfert de charges entre CL et Ca<sup>2+</sup>. La HOMO est principalement localisée sur CL et la LUMO est localisée sur l'ion Ca<sup>2+</sup>. D'autres voies de chélation ont été explorées dans le cas du complexe (LC)<sub>2</sub>Ca, formé par l'interaction de deux anions CL<sup>-</sup> avec Ca<sup>2+</sup>.

**Mots-Clés:** Taxol, cellules cancéreuses, Ca<sup>2+</sup>, DFT, transfert de charge.

---

\*Intervenant

<sup>†</sup>Auteur correspondant: mez\_brahimi@yahoo.fr

<sup>‡</sup>Auteur correspondant: s.abtouche@yahoo.fr