



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

Avis de Soutenance

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Madame KHAOULA MKHAYAR

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie Physique et Modélisation

Sujet de la thèse

Chimie informatique et biostatistique appliquées à l'étude des composés organiques pour la conception de nouvelles molécules à visée thérapeutique anticancéreuse et antibactérienne

Formation Doctorale " Sciences et Génie de la Matière, de la Terre et de la Vie "

Thèse présentée et soutenue **le samedi 11 mai 2024 à 10h** à l'Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès, devant le jury composé de :

NOM ET PRÉNOM	TITRE	ETABLISSEMENT	
Hassan MOUSTABCHIR	PES	Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès	Président
Mohammed BOUACHERINE	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Hamid TOUFIK	PES	Faculté Polydisciplinaire de Taza	Rapporteur
Menana EL HALLAOUI	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mehraz de Fès	Rapporteur
Samir CHTITA	PH	Faculté des Sciences Ben M'Sick de Casablanca	Examineur
Abdelkbir ERROUGUI	PH	Faculté des Sciences Ben M'Sick de Casablanca	Examineur
Houriya MISBAHI	PH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
Abdelmoula EL ABOUCHI	PA	Université Euromed de Fès	Invité
Souad EL KHATTABI	PH	Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès	Directeur de Thèse

Laboratoire de recherche : Laboratoire d'Ingénieur, Systèmes et applications

Etablissement : Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

Résumé de la thèse

Pour accélérer le processus de découverte des molécules bioactive à visée thérapeutique et réduire le coût et la durée de la mise sur le marché de nouveaux médicaments, l'industrie pharmaceutique s'oriente, de nos jours et de plus en plus, vers des techniques de modélisation moléculaires et de conception des médicaments assistées par ordinateur (CADD) faisant intervenir un long processus et des connaissances scientifiques polydisciplinaires.

Ainsi, dans le cadre de ce processus et démarche, une analyse statistique des descripteurs moléculaires est effectuée afin de mieux comprendre la relation entre la structure des molécules et leurs activités, QSAR. Ces modèles, robustes et précis, simplifient grandement la conception de nouveaux composés biologiquement actifs. Les molécules sélectionnées, démontrant une activité prometteuse, passent par des filtres "drug-likeness" et ADMET pour évaluer leur aptitude à devenir des médicaments. Par la suite, le docking moléculaire est employé pour éclaircir les mécanismes de liaison et les interactions entre le ligand et la protéine, suivi par des études de dynamique moléculaire pour évaluer la stabilité des complexes (Ligand-protéine).

Dans le cadre de cette thèse, nous avons mis en œuvre ce processus multi-étapes, afin de concevoir des candidats médicaments anticancéreux et antibactérienne. C'est dans ce sens, que nous avons étudié des séries de composés à base de cyclohexane-1,3-dione et les dérivés de la dimédone qui présentent des activités anticancéreuses, particulièrement, le cancer des poumons et du colon. Ce processus et démarche, ont été, également, appliquées à une série de dérivés de la 2-aryloxy-1,4-naphtoquinone en tant qu'agents antibactériens.

Les résultats de ces recherches nous ont permis de suggérer de nouveaux composés prometteurs dans le domaine de la recherche médicamenteuse contre le cancer et les infections bactériennes.

Keywords : CADD, QSAR, Drug-likeness, ADMET, Docking moléculaire, Dynamique moléculaire, Cancer, infections bactériennes.