



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

Avis de Soutenance

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Monsieur SAID EL RHABORI

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie physique et Modélisation

Sujet de la thèse

Modélisation moléculaire et recherche in silico de biomolécules à intérêt thérapeutiques pour le traitement des pathologies chroniques

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

Thèse présentée et soutenue **le samedi 26 octobre 2024 à 10h** à l'Amphi F à la Faculté des Sciences et Techniques de Fès, devant le jury composé de :

NOM ET PRÉNOM	TITRE	ETABLISSEMENT	
Hicham ZAITAN	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
Ali AMECHROUQ	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Hamid MAGHAT	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Abdelkrim OUAMMOU	PES	Faculté des Sciences Dhar ElMehraz de Fès	Rapporteur
Mohammed BOUACHRINE	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Examineur
Abdelhadi LHASSANI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
Hakima EL KNIDRI	MC	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Invitée
Samir CHTITA	MCH	Faculté des Sciences Ben M'Sick de Casablanca	Co-Directeur de Thèse
Fouad KHALIL	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeur de thèse

Laboratoire de recherche : Procédés, Matériaux et Environnement

Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



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

Résumé de la thèse

Le développement d'un médicament est un processus complexe, long et coûteux, et le taux d'échec est élevé. Cette problématique a constamment orienté les processus de recherche et de développement de médicaments vers l'adoption de méthodes de criblage rapide, en particulier *in silico*. La recherche décrite dans cette thèse de doctorat se concentre sur l'application de la conception de médicaments assistée par ordinateur (computer-aided drug design (CADD)) pour surmonter les défis inhérents au coût des médicaments utilisés dans le traitement des maladies chroniques telles que le cancer du sein et du col de l'utérus. Ces objectifs sont abordés en s'appuyant sur des méthodologies scientifiques avancées, notamment la conception de médicaments basée sur la structure (SBDD) et la conception de médicaments basée sur les ligands (LBDD). En outre cette recherche s'appuie sur des méthodes statistiques inférentielles et des techniques d'apprentissage automatique supervisé, notamment les relations quantitatives structure-activité (QSAR). Parallèlement, elle utilise autres techniques de modélisation moléculaire, englobant la mécanique moléculaire et la chimie quantique utilisant l'approche de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'amarrage moléculaire, l'élucidation des pharmacophores et les simulations de la dynamique moléculaire sont également utilisés pour résoudre ces problèmes complexes. En outre, l'étude a appliqué avec précision la règle des cinq de Lipinski et les analyses ADME-Tox pour évaluer les propriétés pharmacocinétiques et la toxicité des nouvelles molécules, révélant leur caractère unique par rapport aux composés existants. Ces résultats encouragent la poursuite des recherches sur leur potentiel en tant qu'agents anticancéreux, compte tenu de leur efficacité inhibitrice notable.

Mots clés : Maladies chroniques, Cancer du sein, cancer du col de l'utérus, CADD, SBDD, LBDD, QSAR, Modélisation moléculaire, ADME-Tox.