



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

Avis de Soutenance

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Madame SOUKAINA BENKIRANE

Discipline : Chimie d'intérêt biologique
Spécialité : Chimie organique et Pharmacochimie

Sujet de la thèse

Nouvelles bases de Schiff dérivées de la pyrimidine et de la nitroaniline : Synthèse et étude, in vitro et in silico, des propriétés antibactérienne, antioxydante et anticancéreuse

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

Thèse présentée et soutenue le **samedi 24 octobre 2026 à 09h30** au Centre des Conférences de la Faculté des Sciences et Techniques de Fès, devant le jury composé de :

NOM ET PRÉNOM	TITRE	ETABLISSEMENT	
El Mestafa EL HADRAMI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
AMINA AMINE	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
SOUFIANE EL MARRAKCHI	Pr Agrégé	Faculté de Médecine et de Pharmacie et Médecine Dentaire de Fès	Rapporteur
SAID ACHAMLALE	MCH	Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation de Fès Meknès	Rapporteur
SAID EL KAZZOULI	PES	Université Euromed de Fès	Examineur
SOUAD EL KHATTABI	PES	Ecole Nationale des Sciences Appliquées de Fès	Examineur
SAMIRA BOUHDID	MCH	Faculté des Sciences de Tétouan	Examineur
HOURIA MISBAHI	MCH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeur de thèse

Laboratoire de recherche : Laboratoire Chimie Organique Appliquée
Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



Résumé de la thèse

Face à l'émergence des résistances aux traitements anticancéreux et antibactériens, couplée à l'implication majeure du stress oxydatif dans de nombreuses pathologies, le développement de nouvelles entités bioactives constitue une nécessité urgente en chimie médicinale. Dans ce cadre, les bases de Schiff ont été retenues en raison de leur large spectre d'activités biologiques.

Notre travail porte sur la synthèse et l'évaluation du potentiel biologique de deux séries originales de bases de Schiff dérivées de la pyrimidine et de la nitroaniline. Les molécules ont été obtenues par une réaction en une seule étape, réalisée dans des conditions simples, avec de bons rendements et des temps de réaction réduits. Leur structure a été confirmée par différentes techniques de caractérisation (RMN ¹H, RMN ¹³C, FT-IR, UV-visible et spectrométrie de masse), confirmant la formation de la liaison azométhine.

L'évaluation biologique, réalisée in vitro et complétée par une étude in silico, a montré des activités intéressantes sur plusieurs cibles thérapeutiques. Concernant l'activité anticancéreuse, les études in silico ont révélé des interactions notables avec CDK8 et l'ADN ligase IV. Ces résultats indiquent un potentiel d'action sur deux cibles impliquées dans la prolifération cellulaire et la réparation de l'ADN. Les résultats in vitro de l'activité antibactérienne ont montré une efficacité sélective contre staphylococcus aureus, en lien avec des interactions in silico avec la protéine PBP2a impliquée dans les mécanismes de résistance bactérienne. L'activité antioxydante a été évaluée par plusieurs tests in vitro (TAC, DPPH, FRAP et β -carotène), soulignant un pouvoir antioxydant globalement important, parfois comparable ou supérieur à la référence. Ces résultats sont soutenus par des études in silico montrant des interactions favorables avec les enzymes MPO et NOX2, impliquée dans les mécanismes du stress oxydatif. L'ensemble des résultats confirme l'intérêt de nos bases de Schiff comme molécules bioactives capable d'interagir avec des cibles thérapeutiques intéressantes, et ouvre la voie à de futures études pharmacologiques plus approfondies.

Mots clés : Bases de Schiff; synthèse; activité anticancéreuse; activité antibactérienne; activité antioxydante; docking moléculaire; dynamique moléculaire; ADMET; drug-likeness