



AVIS DE SOUTENANCE THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Mr : YOUNESS BOUKARAI

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie des Molécules bioactives

Sujet de la thèse : Développement de modèles QSAR pour la prédiction d'activités biologiques de molécules organiques bioactives à intérêts pharmaceutiques.

Formation Doctorale : Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie.

Thèse présentée et soutenue le **mardi 23 avril 2019 à 10h** au centre des conférences devant le jury composé de :

Nom Prénom	Titre	Etablissement	
Abdelhadi LHASSANI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
Tahar LAKHLIFI	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Hamid MAGHAT	PES	Faculté des Sciences de Meknès	Rapporteur
Bouchaib IHSSANE	PH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Rapporteur
Abdelkarim OUAMMOU	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mehraz de Fès	Examineur
Fouad KHALIL	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeurs de thèse
Mohamed BOUACHRINE	PES	Ecole Supérieure de Technologie de Meknès	

Laboratoire d'accueil : Chimie Appliquée.

Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



Titre de la thèse : Développement de modèles QSAR pour la prédiction d'activités biologiques de molécules organiques bioactives à intérêts pharmaceutiques.

Nom du candidat : Youness BOUKARAI

Spécialité : Chimie des Molécules Bioactives

Résumé de la thèse

L'objectif de cette étude est d'exploiter les capacités des études de modélisation qui s'orientent actuellement vers la conception et la connaissance de la relation entre les propriétés physico-chimiques (biologiques, toxicité...) et la structure moléculaire permettant de développer de nouvelles entités moléculaires chimiques (médicaments) et de guider la synthèse de nouvelles molécules, qui pourraient être actives et le mieux de prédire certaines activités biologiques ou propriétés pour un certain nombre de séries de molécules. Par ailleurs, les molécules bioactives et leur importance dans le domaine pharmacologique et spécialement dans le traitement de plusieurs maladies cancéreuses et parasitoses, ont fait l'objet de recherche de plusieurs laboratoires à travers le monde. Dans le même contexte, nous nous sommes intéressés dans ce travail à des séries de molécules organiques (tels que l'isatine, les phénothiazines, la diarylaniline, les flavonoïdes et les 5, 6-bicyclic hétérocycles) présentant différentes activités (anticancéreuse, cytotoxicité / antiproliférative, anti-VIH, antidiabétique et anti-Alzheimer). Ainsi, divers descripteurs moléculaires ont été calculés et la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT a été utilisé pour calculer les paramètres électroniques des composés étudiés. L'ensemble des données ont été soumis à l'étude statistique multivariée : l'analyse en composantes principales (ACP), la régression linéaire multiple (RLM), la régression non linéaire multiple (RNLM), et les réseaux de neurones artificiels (RNA). Les modèles obtenus, linéaires et non linéaires, ont été validés en utilisant la validation croisée (VC) avec la procédure Leave-One-Out (LOO) et l'ANOVA.

Mots clés : Activité biologique, QSAR, DFT, RLM, RNLM, RNA, VC, ACP, ANOVA.