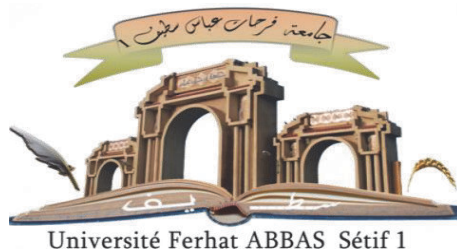


UNIVERSITÉ FERHAT ABBAS SÉTIF 1
FACULTÉ DE MÉDECINE



DÉPARTEMENT DE PHARMACIE

Mémoire De Fin D'étude En Vue De L'obtention
Du Diplôme De Docteur En Pharmacie

CONCEPTION D'ANTIBIOTIQUES ACTIFS
SUR *E.coli* PAR CRIBLAGE VIRTUEL

Soutenu publiquement le : 27/09/2020

Présentée et soutenu par :

GAROUCHE Samir

SOLTANI Soumia

BENGHANEM Loubna

Encadrant :

Dr MOKHENANE Ahmed. M

Maître assistant hospitalo-universitaire en chimie thérapeutique.

Présidente du jury :

Pr.OUYAHIA Amel

Professeur hospitalo-universitaire en maladies infectieuses.

Examineurs :

Dr.ALLAOUA Amina

Maître assistante hospitalo-universitaire en chimie thérapeutique.

Dr.GUEROUI Mehdi

Maître assistant hospitalo-universitaire en chimie thérapeutique.

Dr.RAHMOUNE Hadjer

Praticienne spécialiste assistante en chimie thérapeutique

Année Universitaire 2019/2020

Résumé :

Divers antibiotiques ont été développés contre l'activité pathogène de *Escherichia coli*, mais la résistance à ces médicaments en fait une tâche avantageuse de découvrir des composés avec une activité antibactérienne plus élevée. Ce travail présente une nouvelle approche de la conception de nouveaux antibiotiques, une stratégie appelée « criblage virtuel » pour identifier les inhibiteurs les plus puissants contre l'enzyme ADN gyrase bactérienne. 186 composés ont été criblés au moyen d'un programme de criblage virtuel (MVD) en définissant l'acide nalidixique, la moxifloxacin et la novobiocine comme des ligands de référence. Cette étude nous a permis d'identifier 10 composés qui pourraient être des inhibiteurs potentiels de l'ADN gyrase. Ces composés ont été à la fin filtré par le respect de la règle des 5 de Lipinski et seulement 8 ont obtenu des résultats comparativement meilleurs. Ces résultats peuvent être utilisés pour développer de nouveaux antibiotiques contre les infections à *Escherichia coli* avec une meilleure efficacité.

Mots clés : Amarrage moléculaire ; Ligand ; Conception de médicaments à base d'un ligand ; Molegro virtual docker ; Inhibition enzymatique ; Inhibiteur, *Escherichia coli*, ADN gyrase.