



Résumé :

L'expérience est un moyen simple d'obtenir des données sur l'activité et les propriétés des composés organiques. Une telle expérience peut être déficiente en ce sens qu'elle nécessite divers échantillons d'organes, qu'elle est beaucoup plus coûteuse et prend beaucoup plus de temps, et qu'elle exige différentes valeurs mesurées utilisées par différents chercheurs. Par conséquent, il serait presque impossible pour ces expériences de fournir des valeurs d'activité pour tous les composés organiques. Il est essentiel d'utiliser des méthodes théoriques pour traiter les inconvénients de l'expérience et prédire les données exactes des composés.

Le développement étendu des études chimiques ainsi que des études théoriques et chimiques permettent aux chercheurs d'obtenir des paramètres physico-chimiques et quantiques précis des composés dans un délai plus court.

La présente thèse vise à développer et à évaluer des modèles QSAR/QSPR pour la prédiction des activités biologiques des composés benzimidazoles. Différentes méthodes ont été utilisées, telles que le DFT pour calculer les descripteurs électroniques, la régression linéaire multiple pour sélectionner les descripteurs pertinents, la fiabilité de ces modèles est testée sur le réseau neuronal, une fois le modèle implémenté, la procédure de validation croisée est utilisée pour valider les modèles obtenus, puis l'activité biologique des composés utilisées dans ce travail a été faite à l'aide du docking moléculaire.

Mots clés : QSAR , RLM , NN, CV, DFT et Docking moléculaire

MOLECULAR MODELING, QSAR STUDIES AND MOLECULAR DOCKING OF A SET OF BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES AS BIOACTIVE COMPOUNDS.

Abstract :

The experiment is a simple way to obtain data on the activity and properties of organic compounds. Such an experiment can be deficient in that it requires various organ samples, is much more expensive and time consuming, and requires different measured values used by different investigators. Therefore, it would be nearly impossible for these experiments to provide activity values for all organic compounds. It is essential to use theoretical methods to deal with the drawbacks of the experiment and predict the exact data of the compounds.

The significant development of chemical studies as well as theoretical and chemical studies allows researchers to obtain accurate physicochemical and quantum parameters of the compounds in a shorter time frame. The aim of this thesis is to develop and evaluate QSAR/QSPR models for the prediction of biological activities of benzimidazole compounds. Different methods were used, such as DFT to calculate the electronic descriptors, multiple linear regression to select the relevant descriptors, the reliability of these models is tested on the neural network, once the model is implemented, the cross-validation procedure is used to validate the obtained models, then the biological activity of the compounds used in this work was performed using molecular docking.

Key Words : QSAR , RLM , NN, CV, DFT et Docking moléculaire